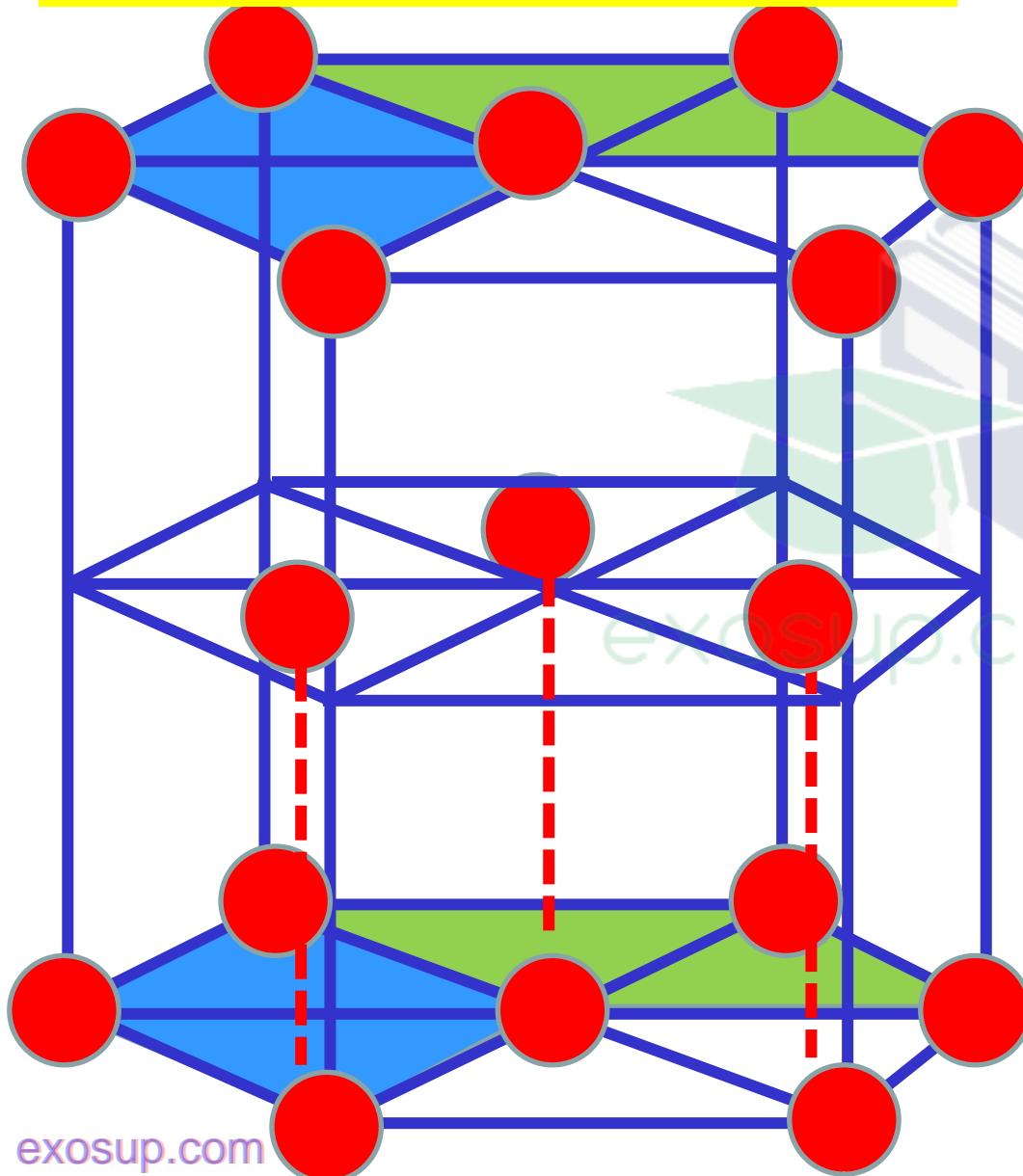
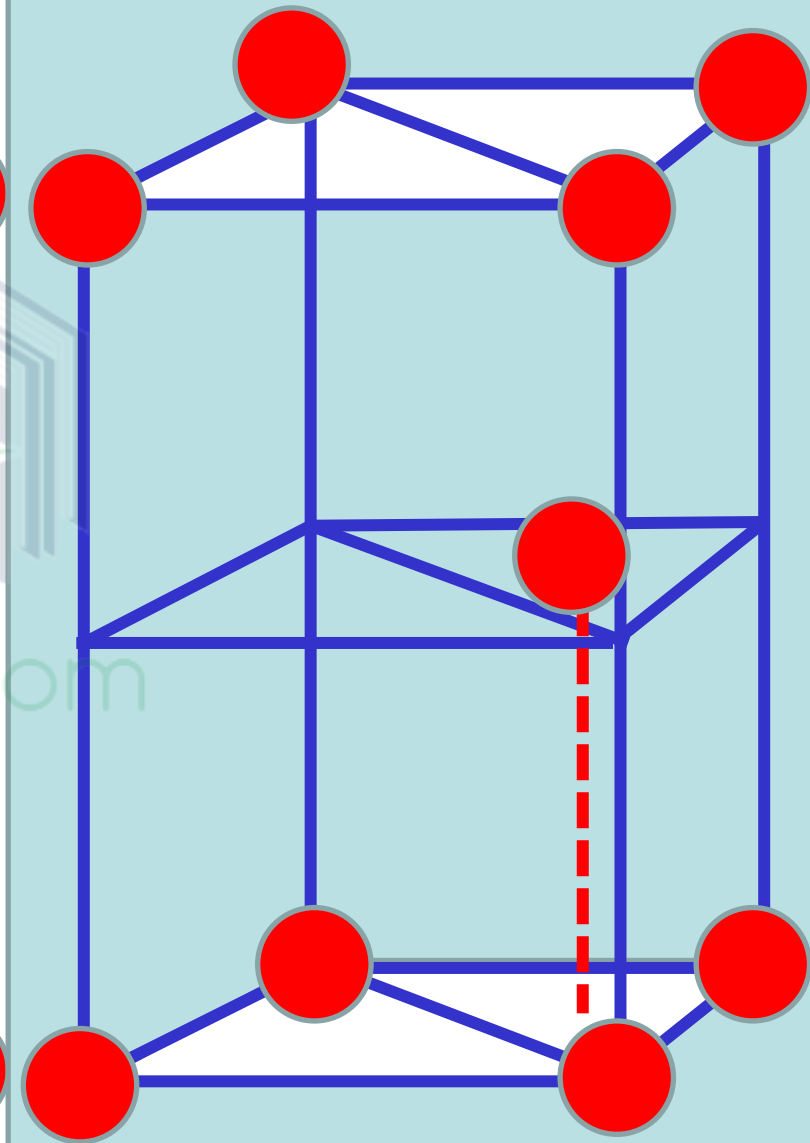


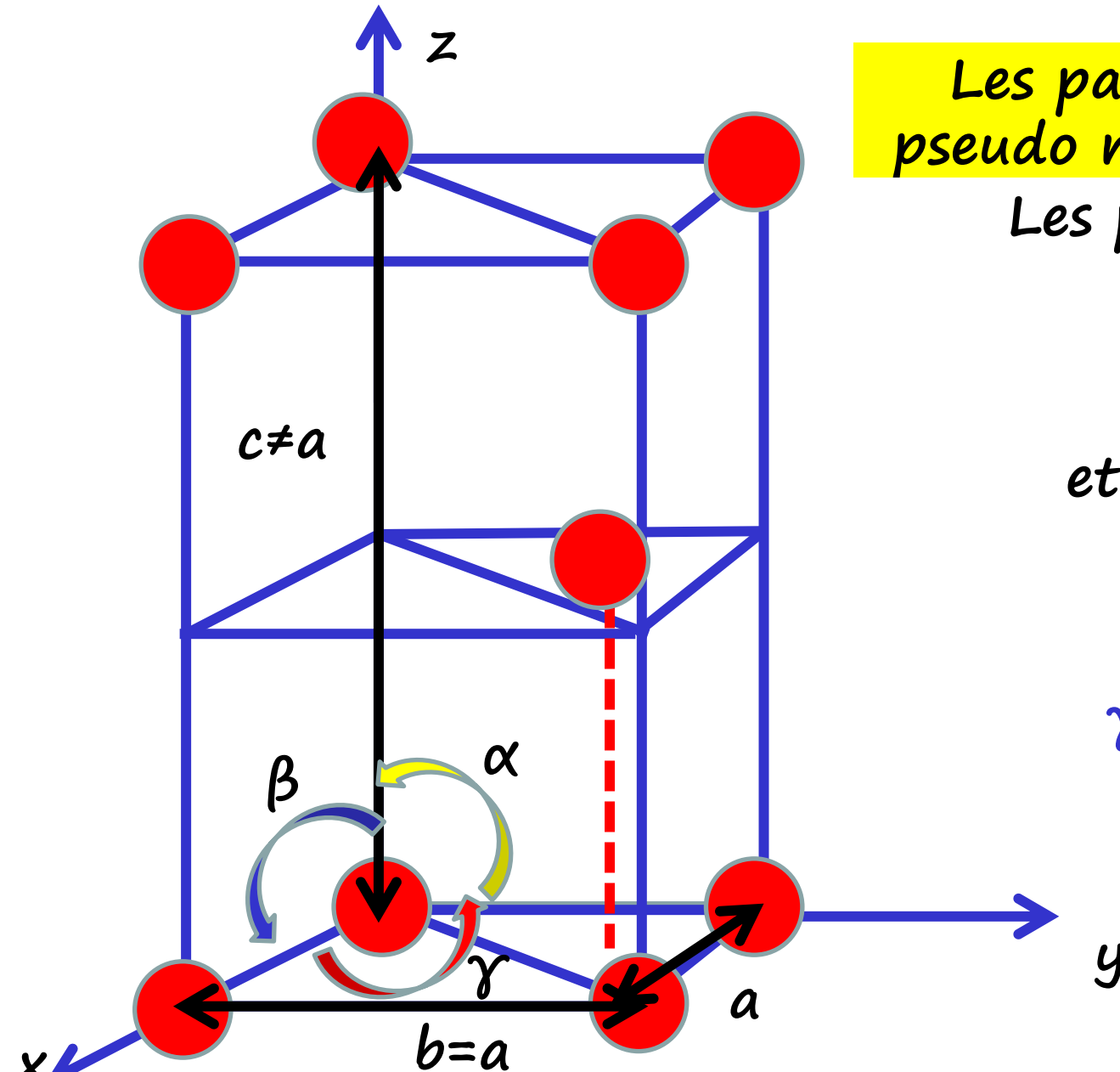
Maille hexagonale compacte,
HC



Pseudo maille
= $\frac{1}{3}$ de la Maille *HC*



Pseudo maille HC



Les paramètres de la pseudo maille hexagonale

Les paramètres :

a

$b = a$

$c \neq a$

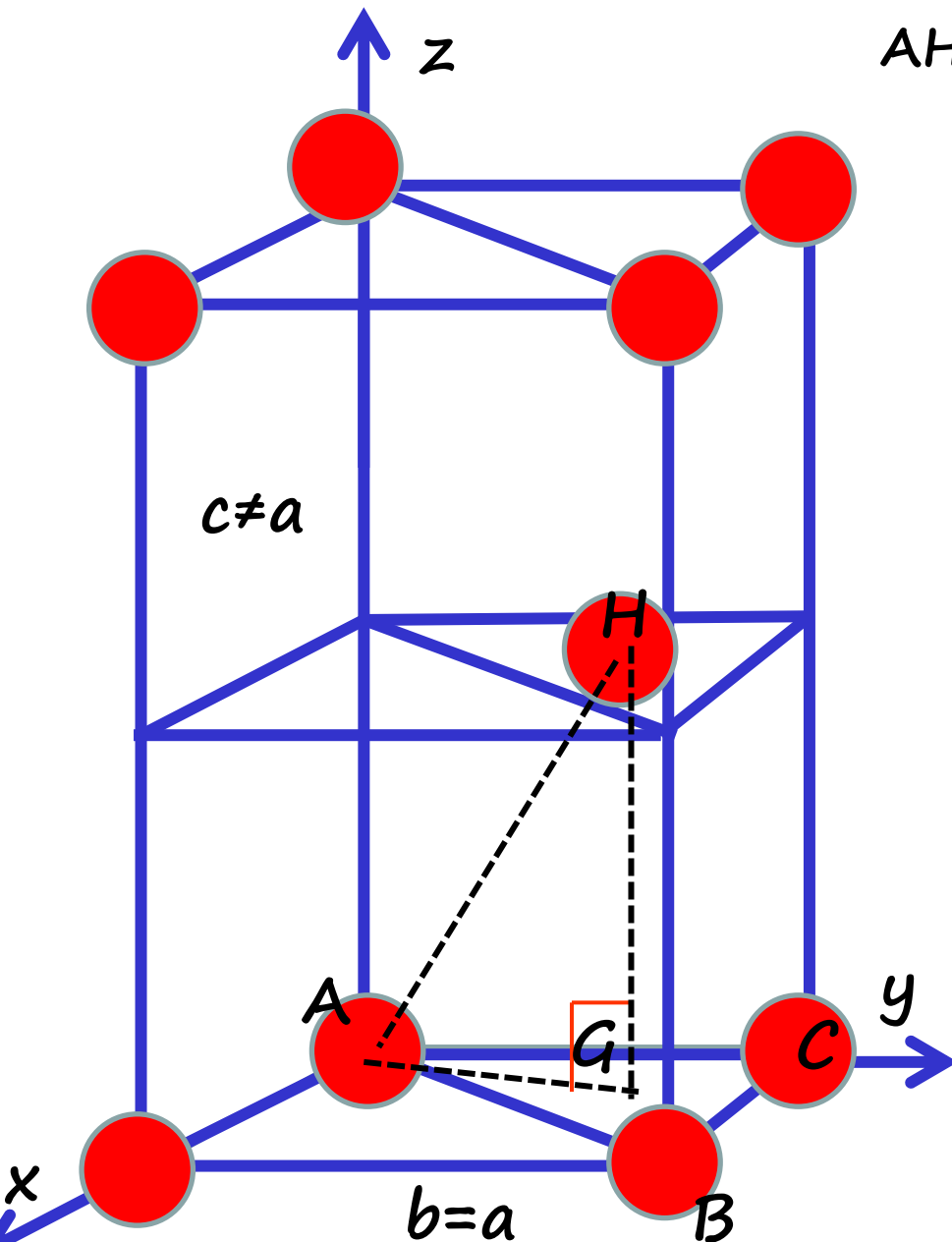
et 3 angles :

$\alpha = 90^\circ$

$\beta = 90^\circ$

$\gamma = 120^\circ$

Pseudo maille HC



Exprimer $c = f(a)$

$$AH = BH = CH = AB = BC = CA = a$$

Le triangle est rectangle
AGH au point G

$$AG^2 + GH^2 = AH^2$$

$$\text{or } GH = c/2$$

$$a^2/3 + c^2/4 = a^2$$

$$c = \sqrt{\frac{8}{3}} \cdot a$$

Le rapport c/a de la maille
hex. Comp. est

une cte = $c/a = \sqrt{8/3} = 1,633$,
qui permet de savoir

Si l'empilement
est compact ou non.

Compacité ou taux de remplissage τ :

$$\text{Compacité } \tau = \frac{n \cdot \text{Volume}(1 \text{ atome})}{\text{Volume}(1 \text{ maille})}$$

Pseudo maille Hexagonal Compacte HC

$$\begin{aligned} n &= \text{nbre d'atomes par pseudo maille} \\ &= 1 + (4 \times 1/6) + (4 \times 1/12) = 2 \text{ atomes /maille} \end{aligned}$$

$$V(1 \text{ atome}) = \frac{4}{3} \pi R^3$$

$$V(1 \text{ pseudo maille}) = a^2 \cdot c \cdot \sin 120^\circ$$

Pseudo maille HC

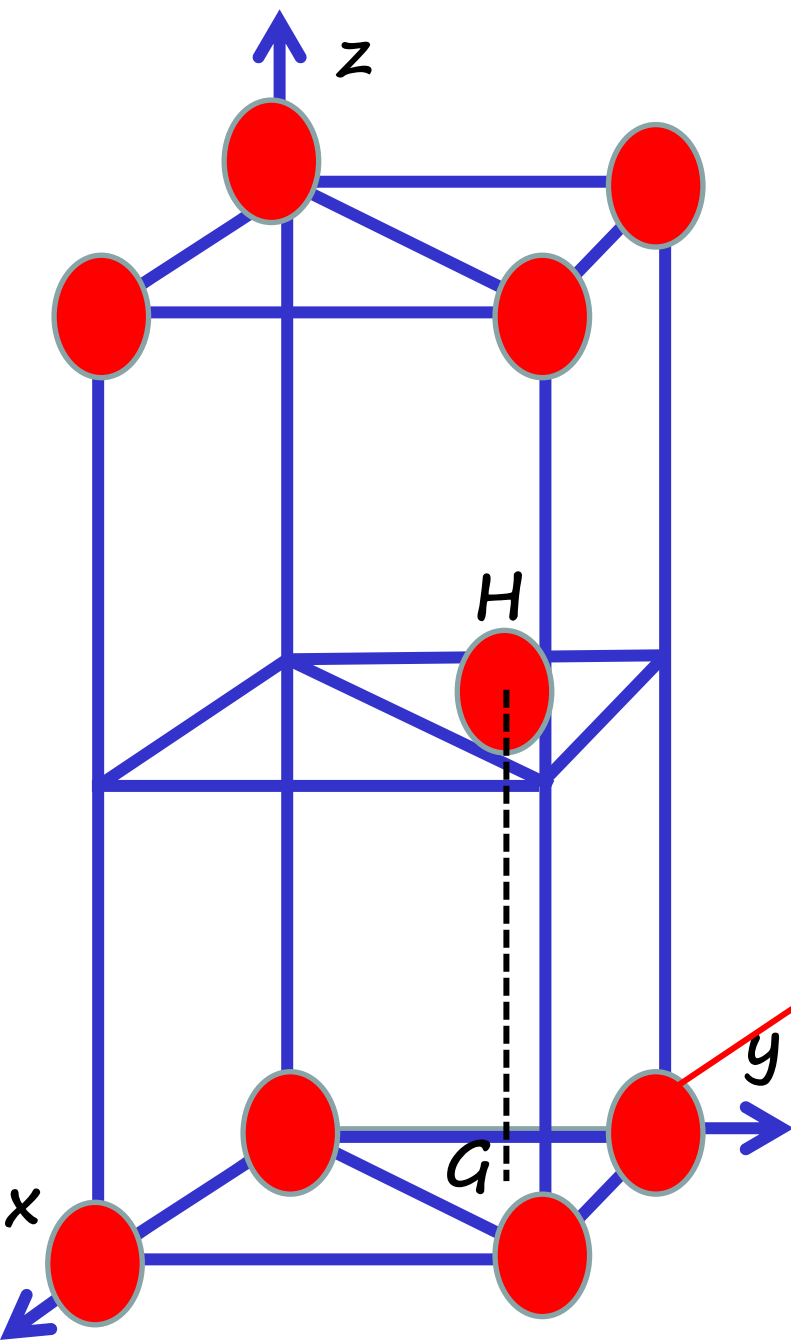
$n = 2$ atomes/ pseudo maille

Relation de tangence :
 $2R = a$

D'où la relation :

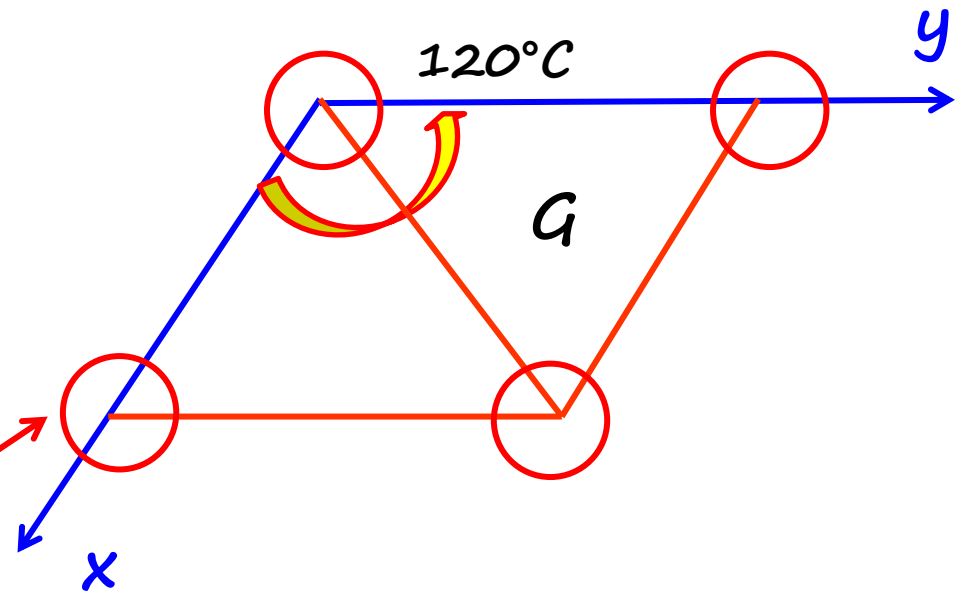
$$\tau = \frac{2 \cdot (4/3) \pi R^3}{a^2 \cdot c \cdot \sin 120^\circ} = \frac{2 \cdot (4/3) \pi (a/2)^3}{a^2 \cdot c \cdot \sin 120^\circ} = 0,74$$

$$c = \sqrt{\frac{8}{3}} \cdot a$$

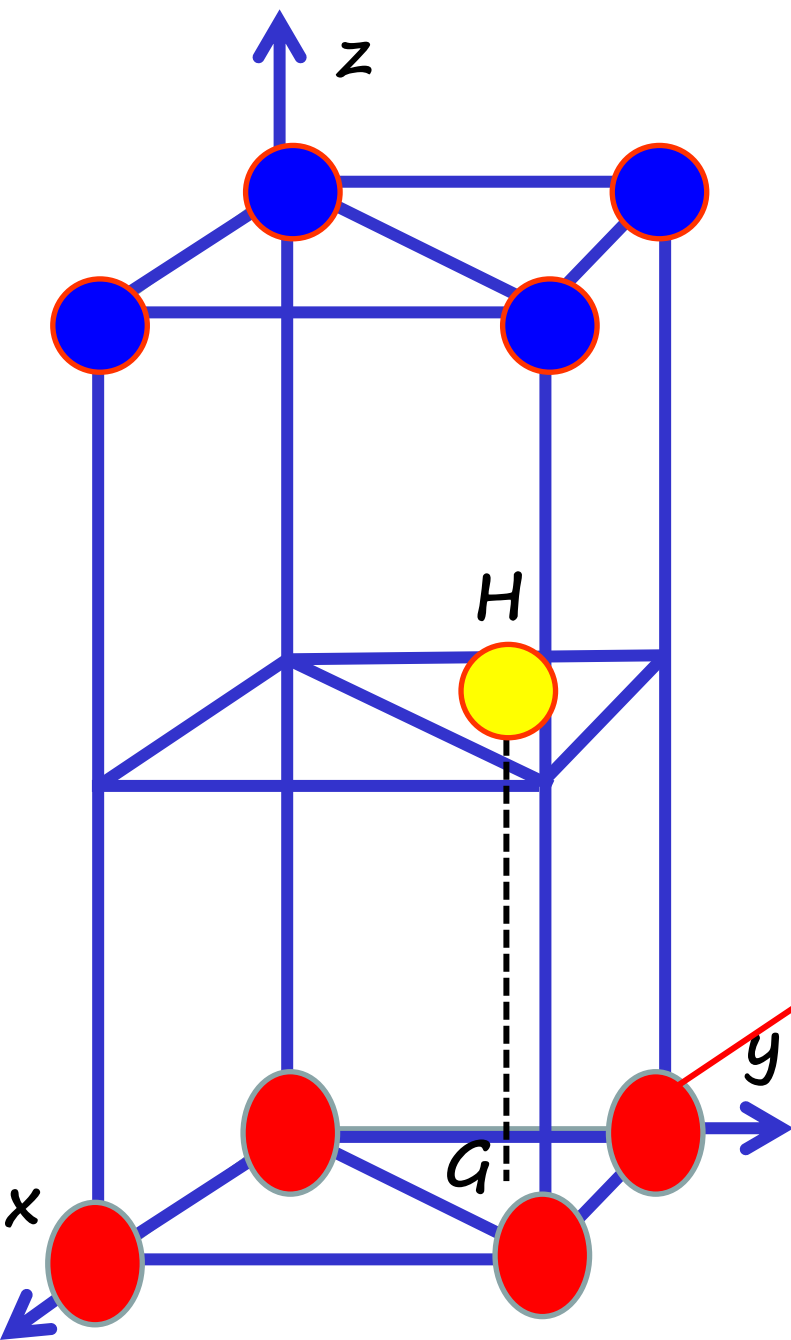


Pseudo maille HC

*Projection / plan
(XOY)*

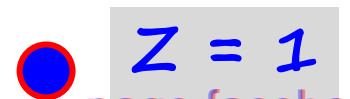
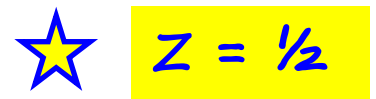
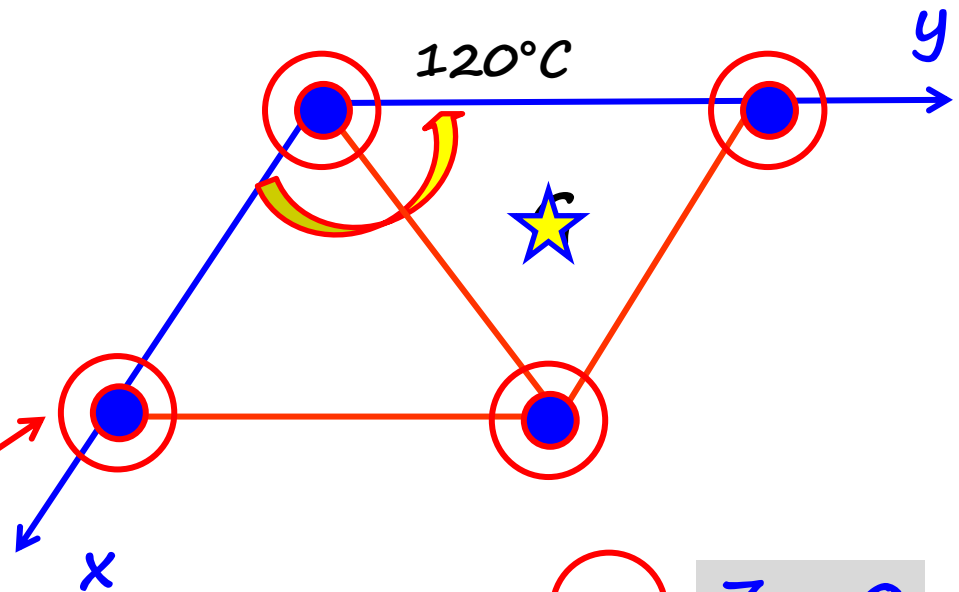


\bigcirc $Z = 0$



Pseudo maille HC

*Projection / plan
(XOY)*



Masse volumique :

$$\rho = \frac{n \cdot M}{N \cdot V} \quad (\text{en g/cm}^3)$$

n : nombre de motifs (*atomes, molécules ou ions*) / maille ;

M : Masse molaire du motif ;

V : volume de la maille

N : nombre d'Avogadro = $6,02 \cdot 10^{23}$

La densité est : $d = \rho / \rho_{\text{eau}}$ (sans unité)

avec $\rho_{\text{eau}} = 1 \text{ g/cm}^3$

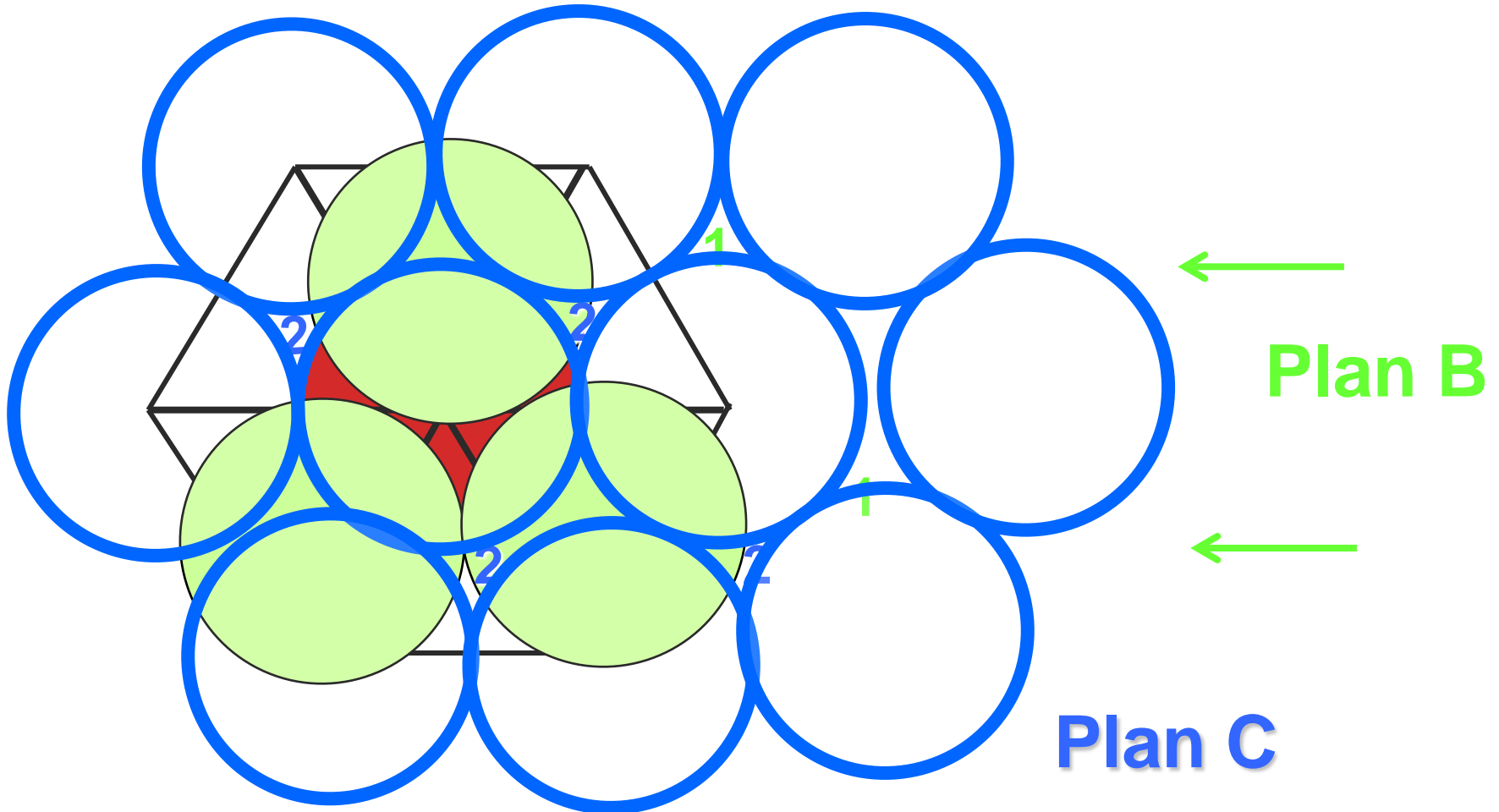
à T ambiante et à $P = 1 \text{ atm}$

2- Troisième plan compact

C :

deux possibilités :

la première est



Plan C

= plan A

2- Troisième plan compact C :

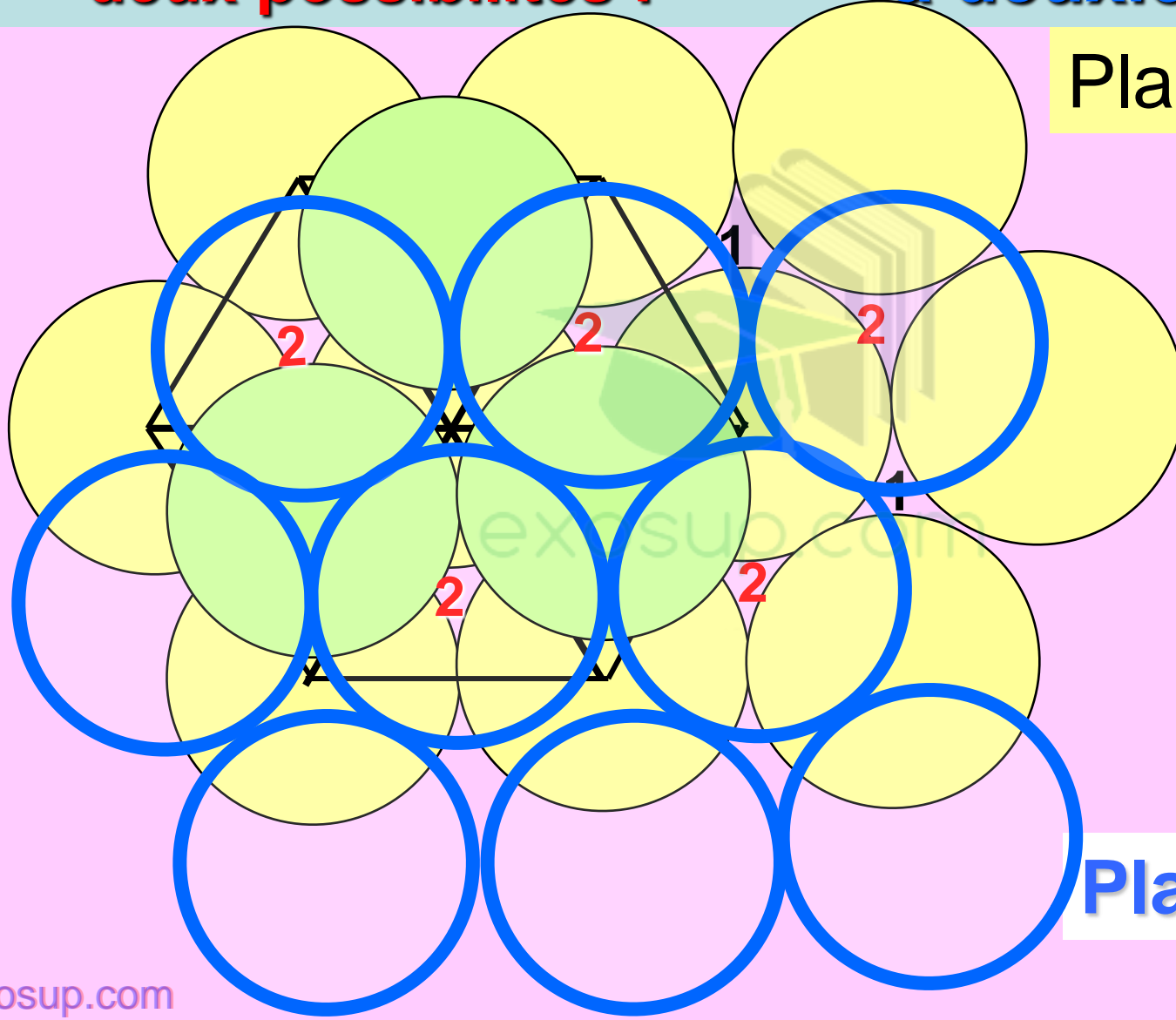
deux possibilités :

la deuxième est

Plan A

Plan B

Plan C

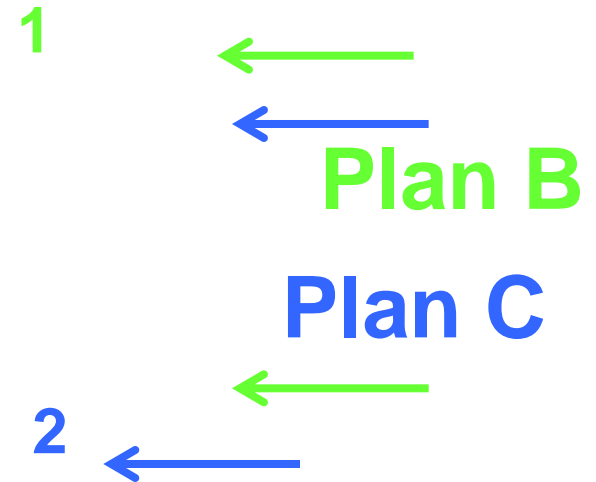
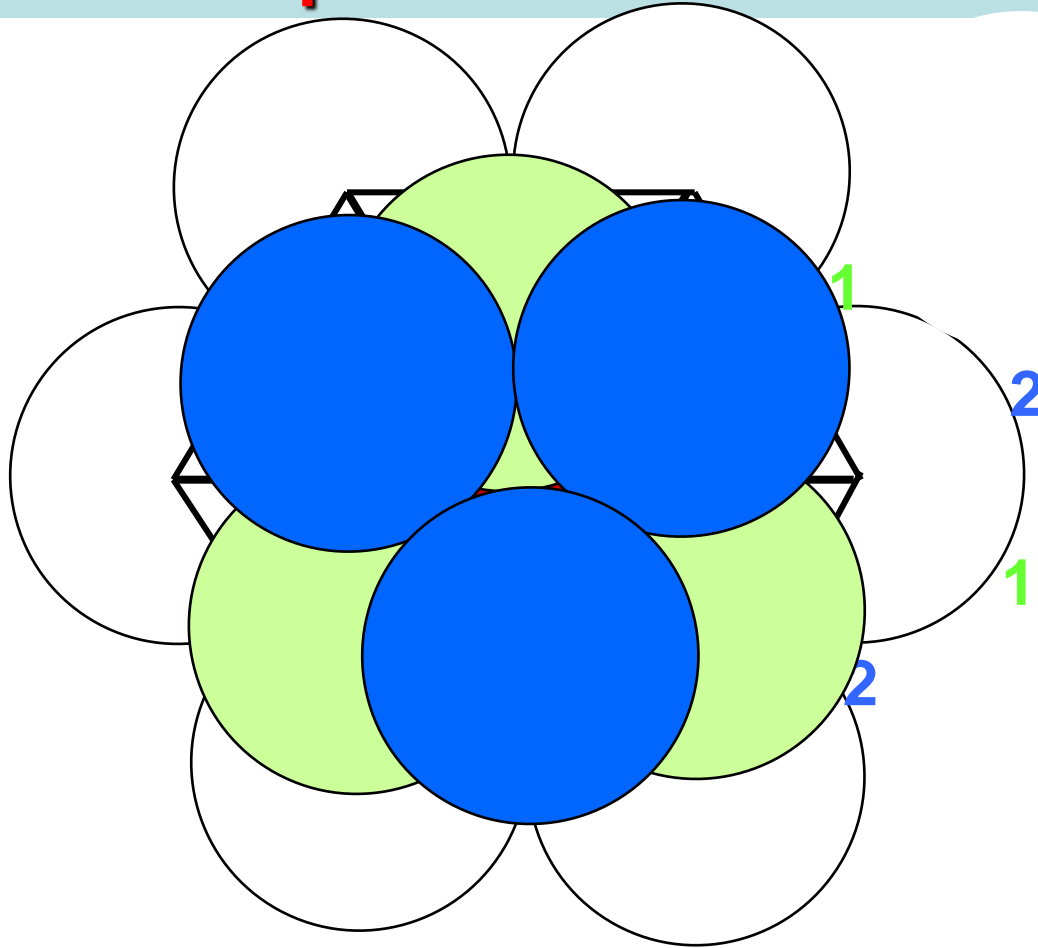


2- Troisième plan compact

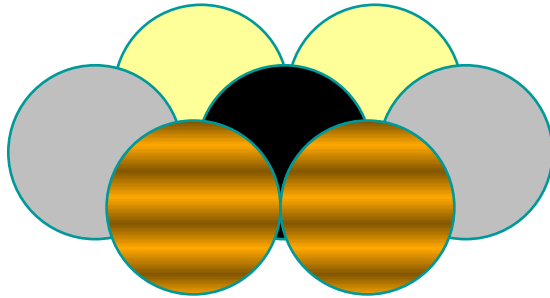
C :

deux possibilités

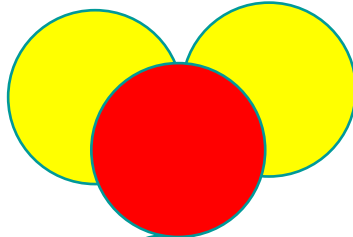
la deuxième est



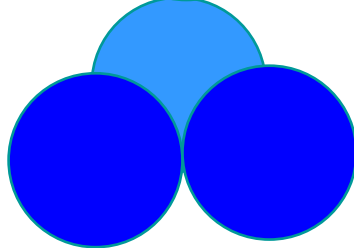
Plan D = A



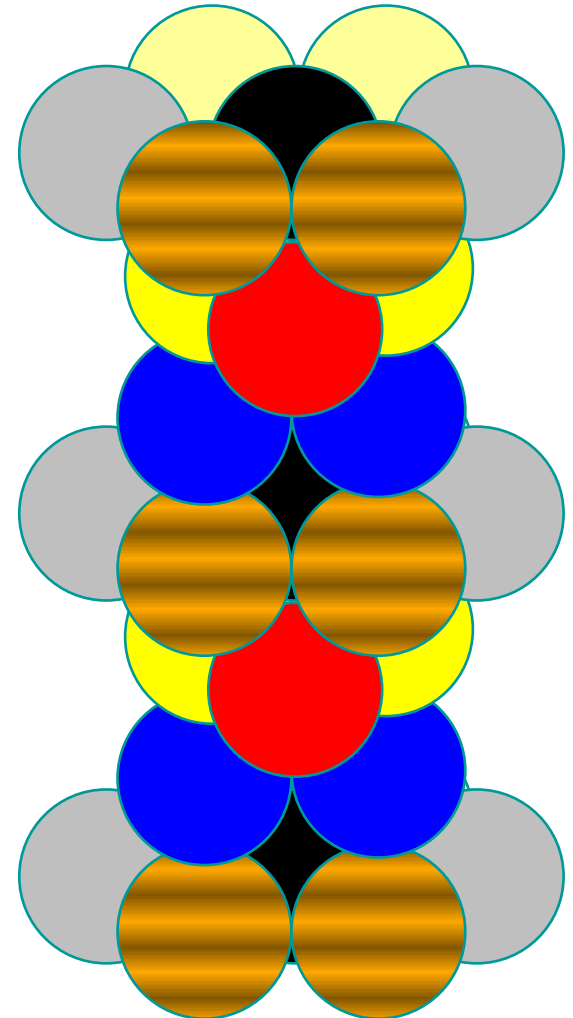
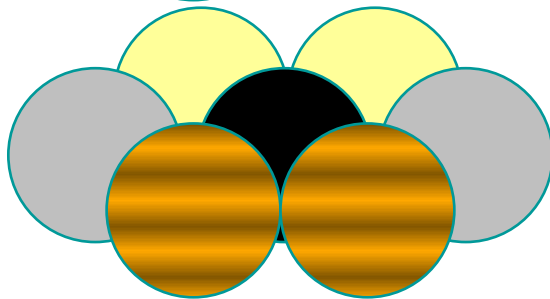
Plan C



Plan B

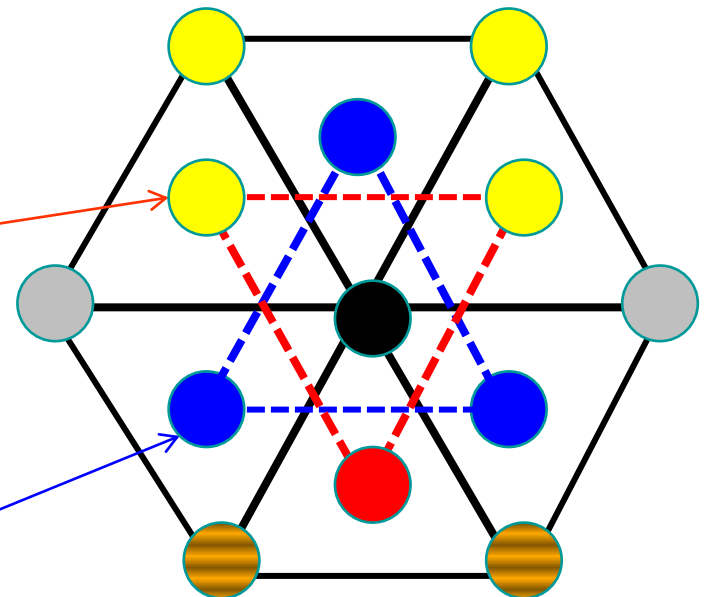
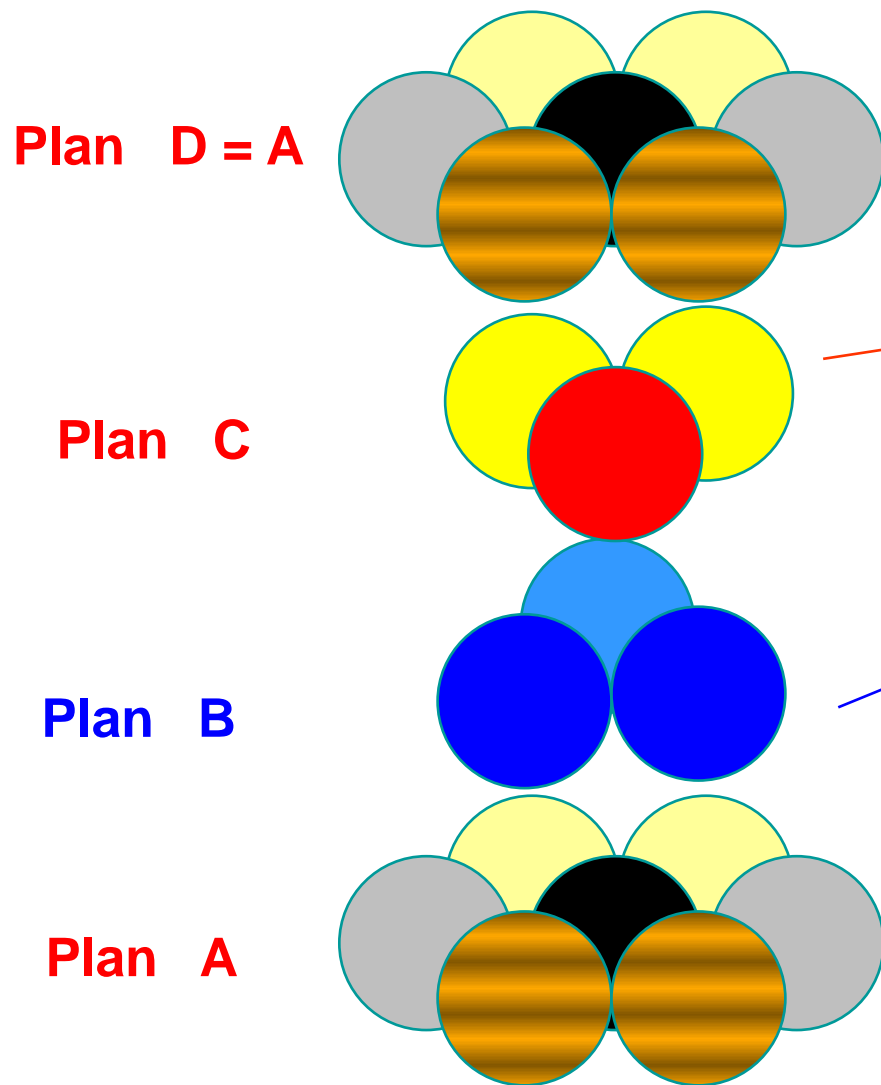


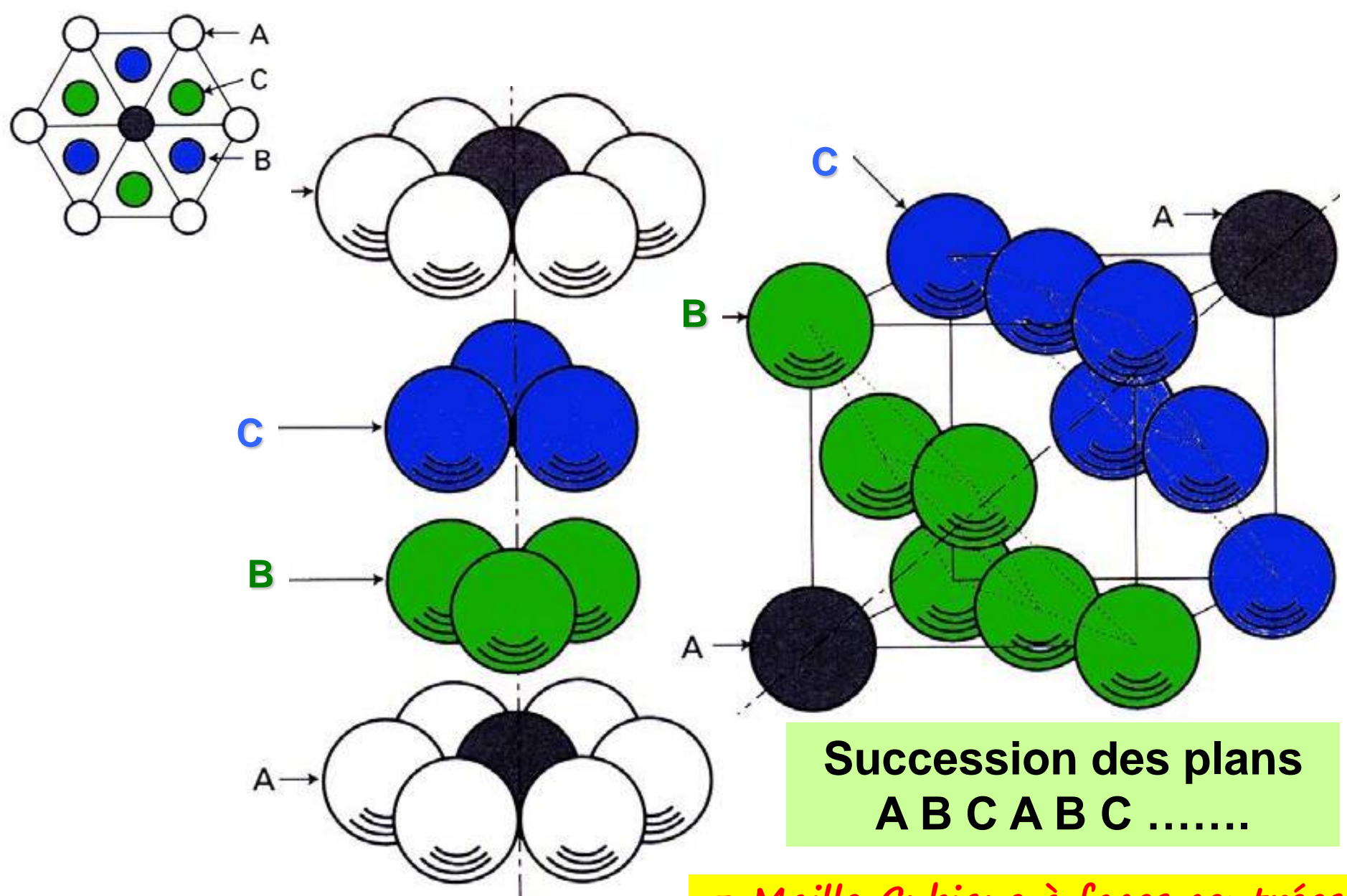
Plan A



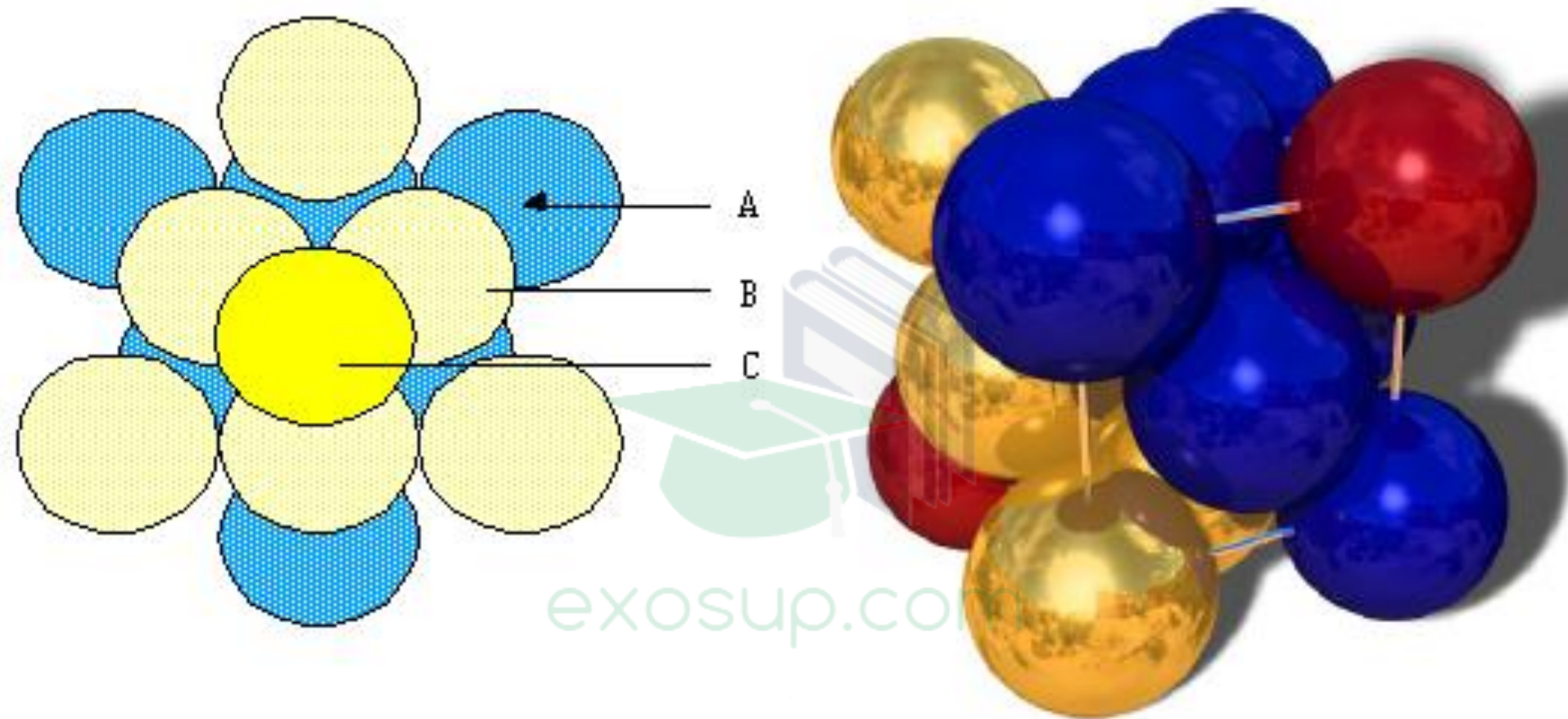
Succession des plans

A B C A B C A B

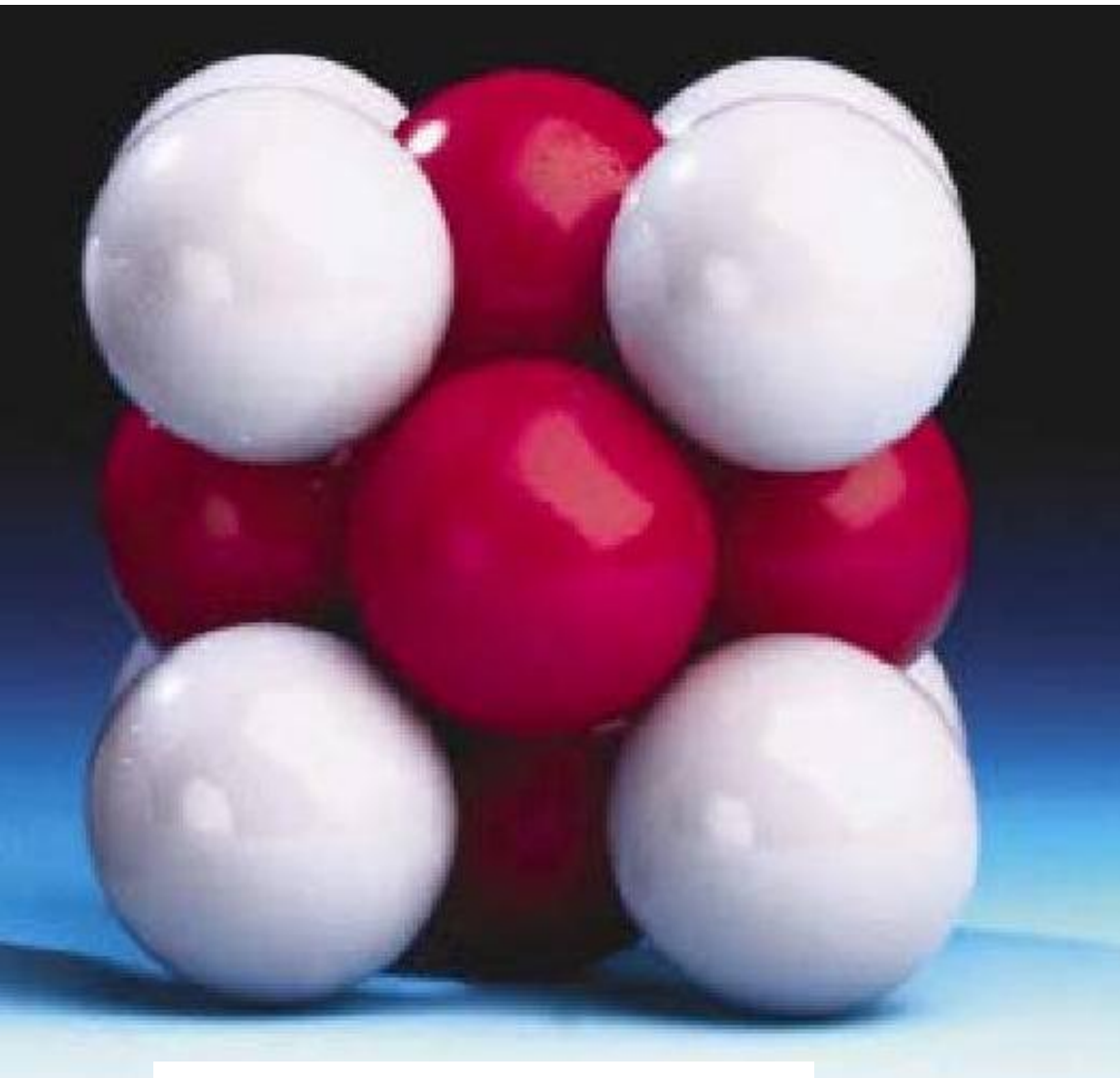




**= Maille Cubique à faces centrées
CFC**

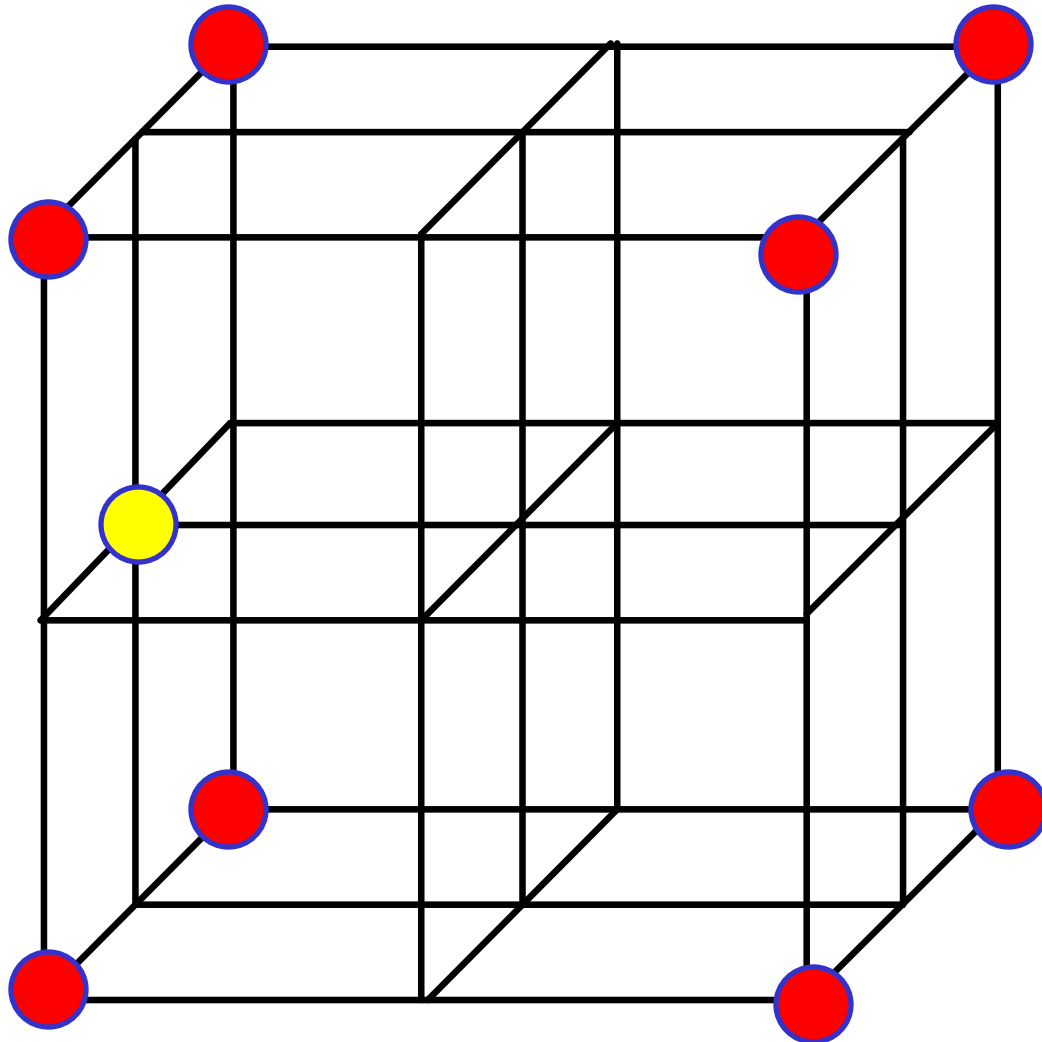


L'empilement compact ABCABC...
donne une structure cubique à faces centrées.



**Maille Cubique à
faces centrées**

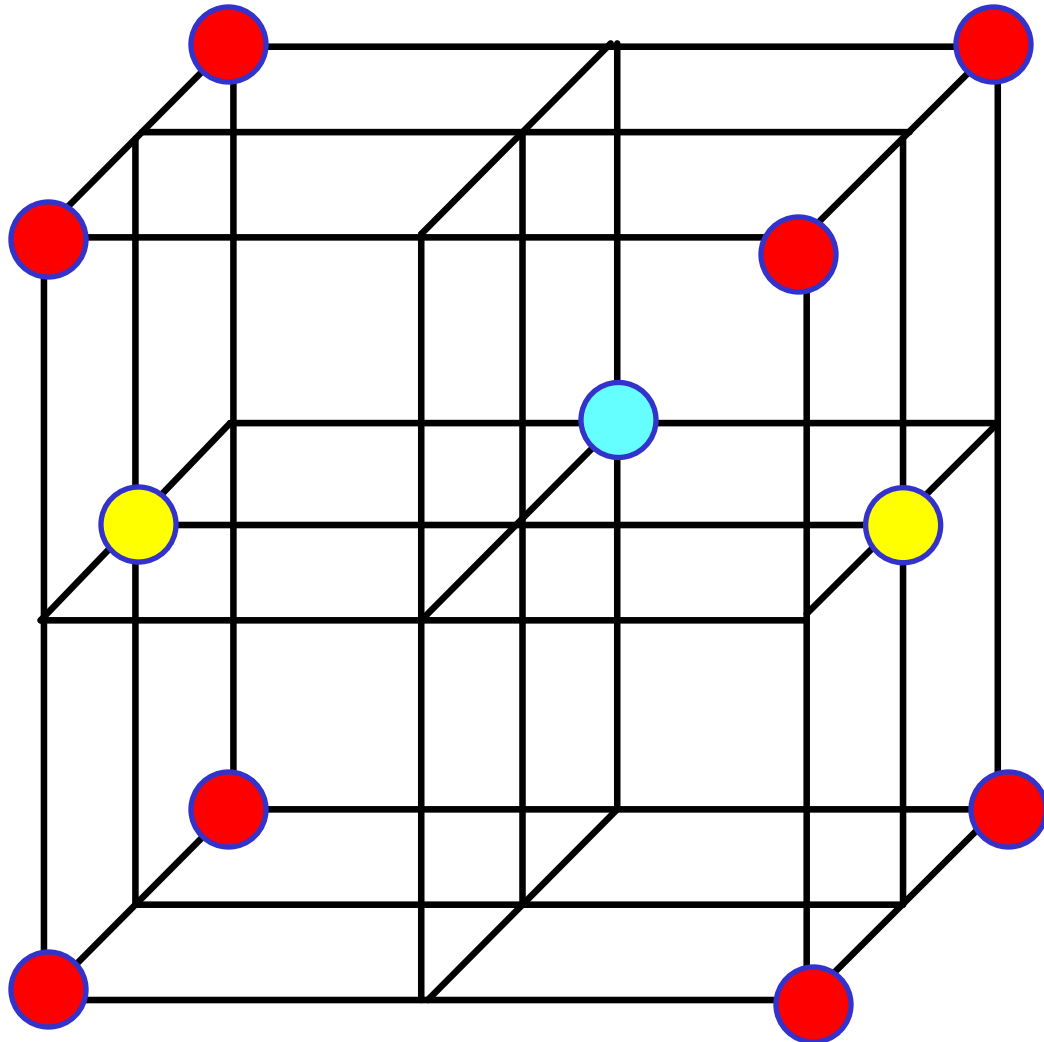
CFC



Coordonnées réduites

$(0, 0, 0)$

$(1/2, 0, 1/2)$

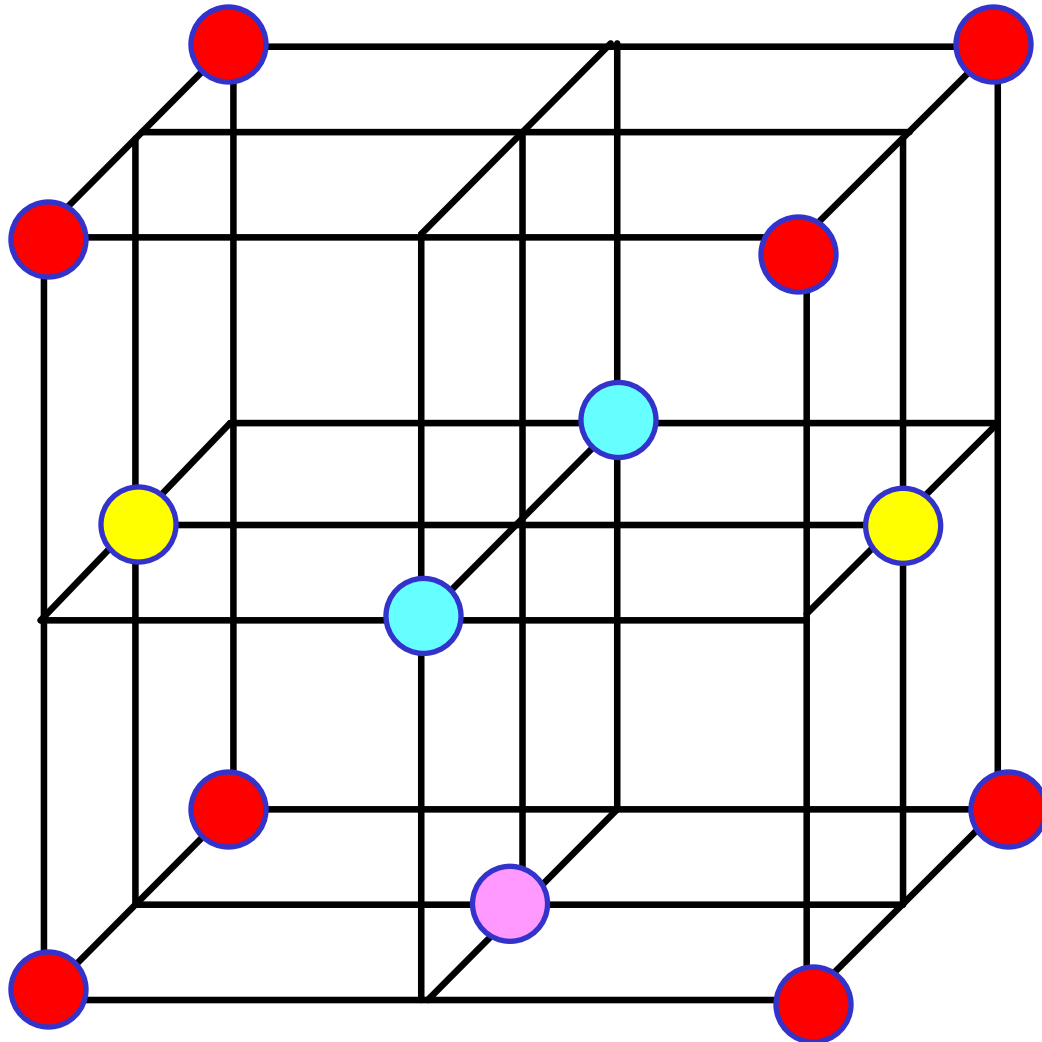


Coordonnées réduites

$$(0, 0, 0)$$

$$(1/2, 0, 1/2)$$

$$(0, 1/2, 1/2)$$



Coordonnées réduites

$$(0, 0, 0)$$

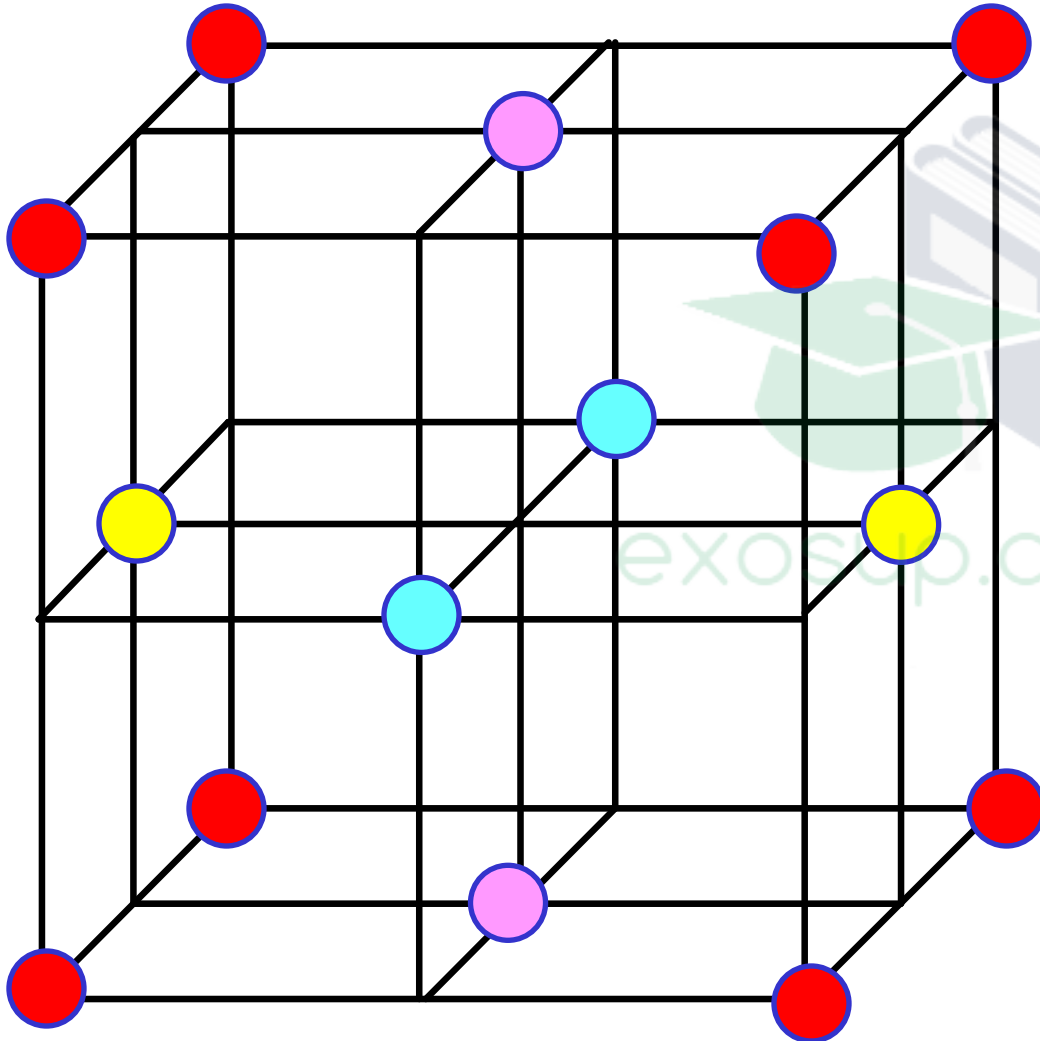
$$(1/2, 0, 1/2)$$

$$(0, 1/2, 1/2)$$

$$(1/2, 1/2, 0)$$

Structure Cubique à faces centrées

Mode du réseau cubique: Mode F



Coordonnées réduites

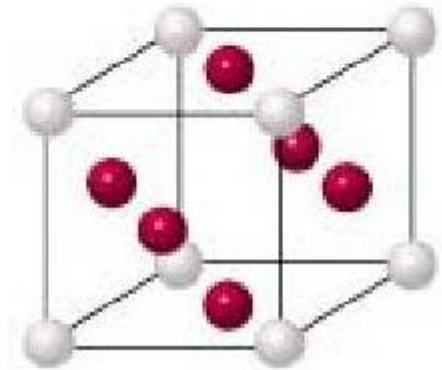
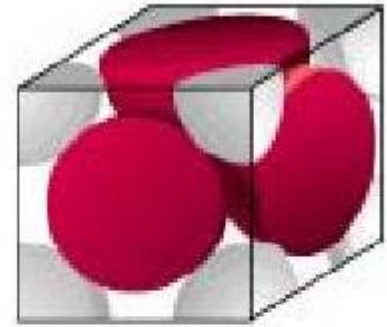
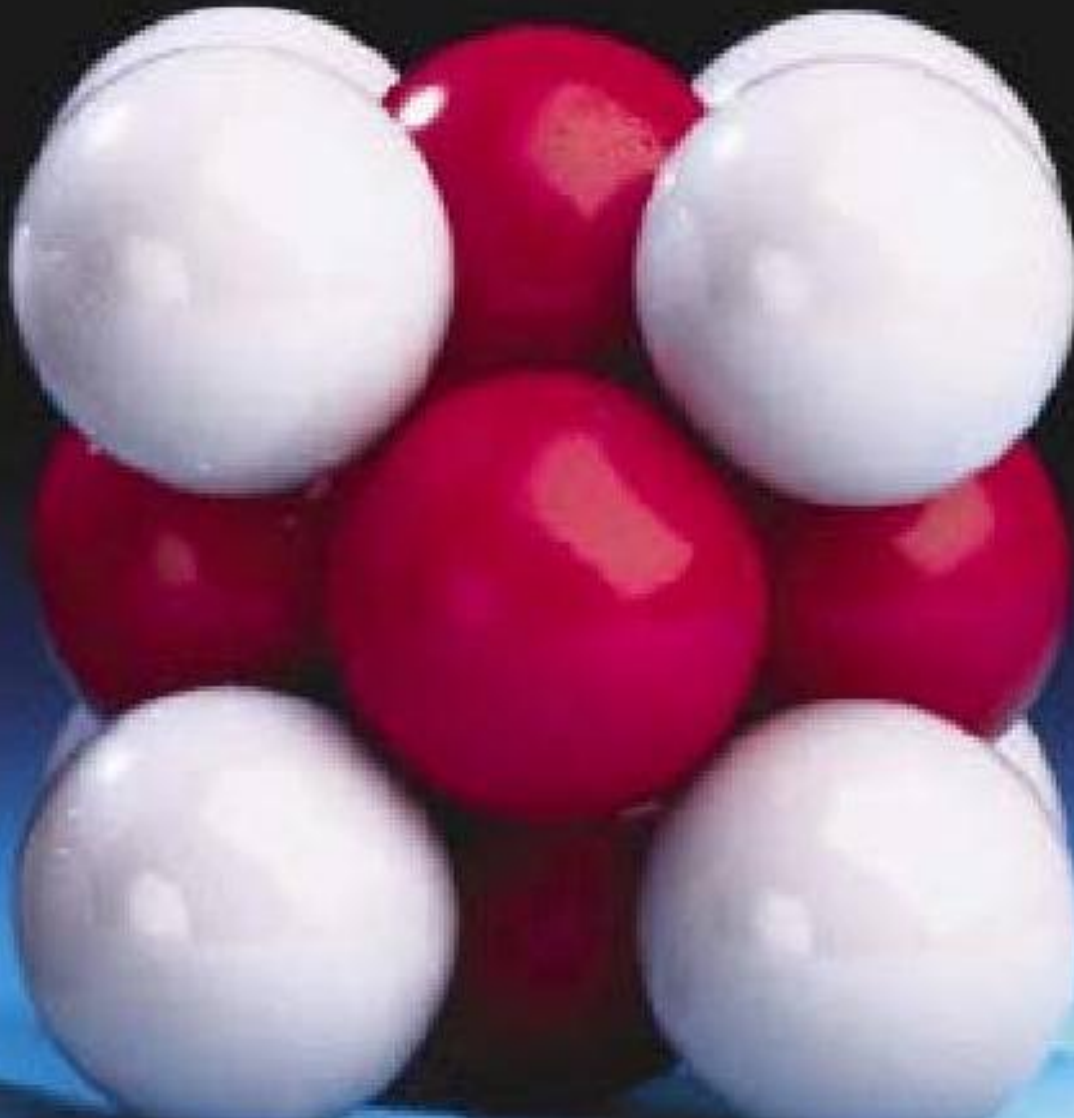
$(0, 0, 0)$

$(1/2, 0, 1/2)$

$(0, 1/2, 1/2)$

$(1/2, 1/2, 0)$

Structure Cubique à faces centrées, Mode F



On compte donc 8 atomes (sommets) $\times 1/8$
+ 6 atomes (faces) $\times 1/2$

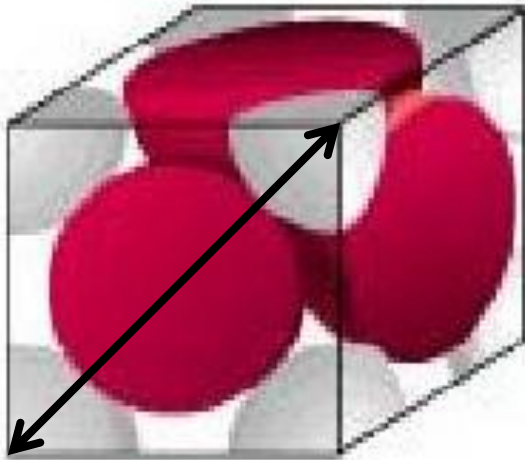
= 4 atomes/maille

Structure Cubique à faces centrées, Mode F

$\tau = n \cdot \text{volume}(1 \text{ atome}) / V(\text{maille})$ avec $n = 4$ atomes/maille

$$v(1 \text{ atome}) = (4/3) \pi R^3 \quad \text{et} \quad V(1 \text{ maille}) = a^3$$

Or pour un **CFC**, les atomes sont tangents selon la diagonale de la face

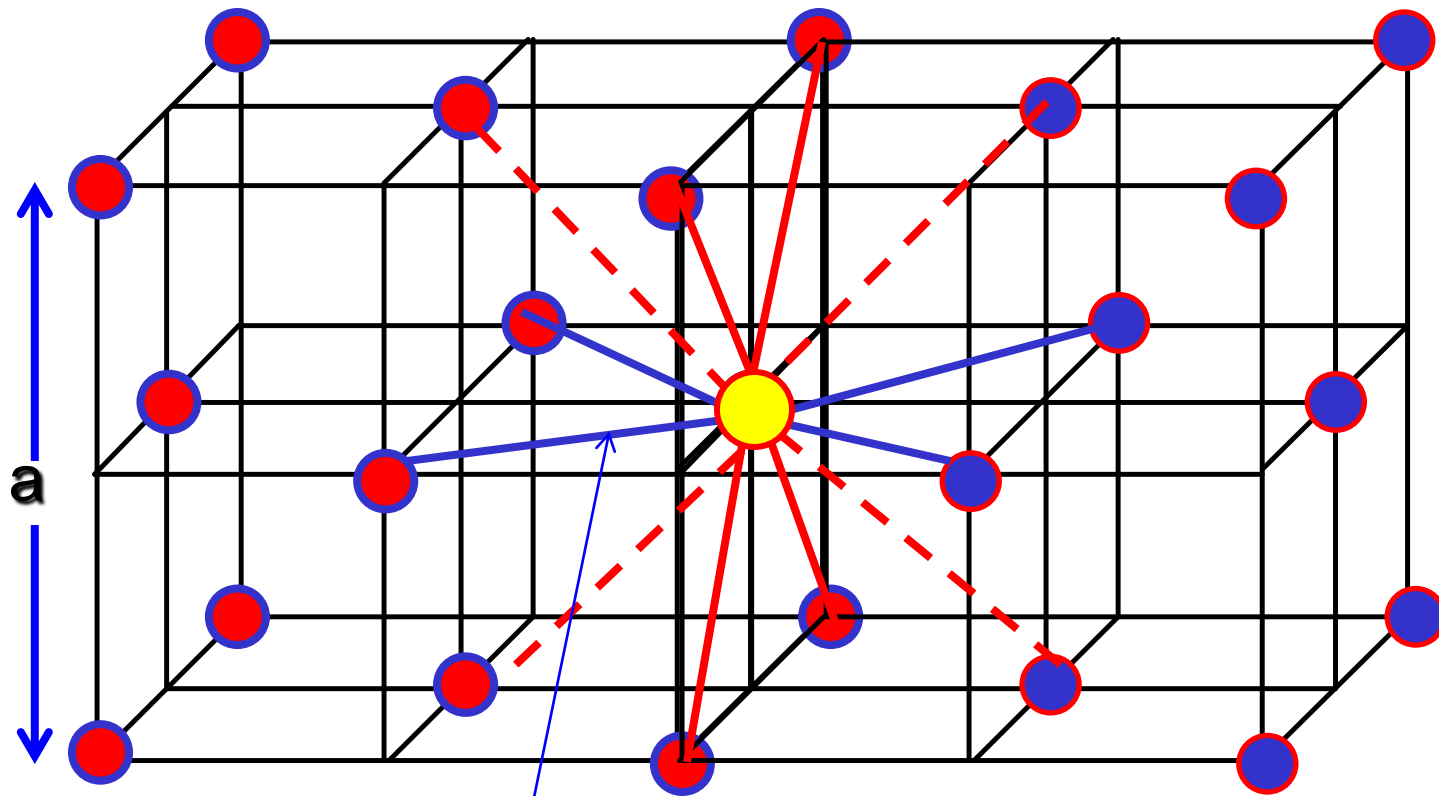


Relation de tangence :
 $4R = a\sqrt{2}$

D'où la relation :

$$\tau = \frac{4 \cdot (4/3) \pi R^3}{a^3} = \frac{4 \cdot (4/3) \pi (a\sqrt{2}/4)^3}{a^3} = 0,74$$

Structure Cubique à faces centrées, Mode F



coord. = ?

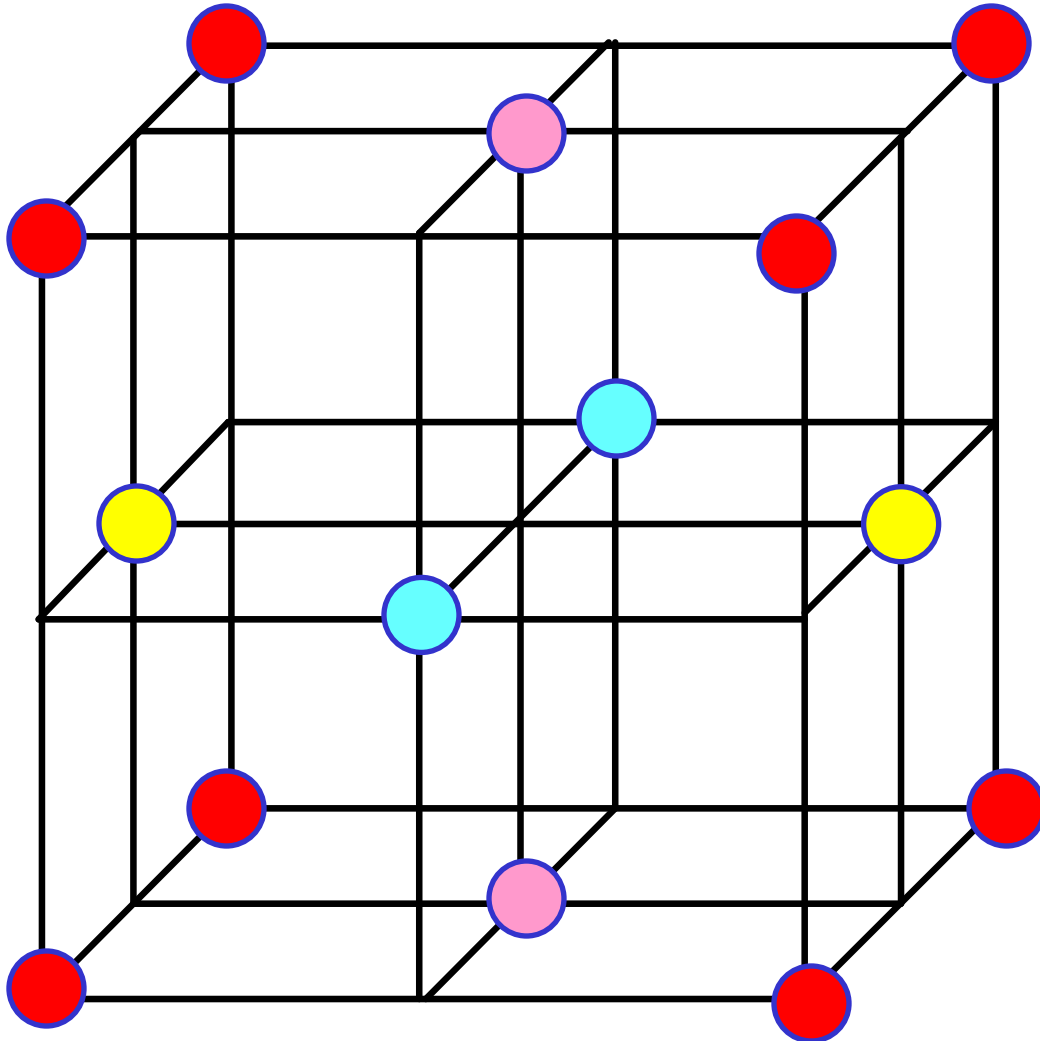
2 atomes sont situés
à la distance $a\sqrt{2}/2$.

Chaque atome a
12 proches voisins

coord. = 12

Structure Cubique à faces centrées

Mode du réseau cubique: Mode F



Coordonnées réduites

$(0, 0, 0)$

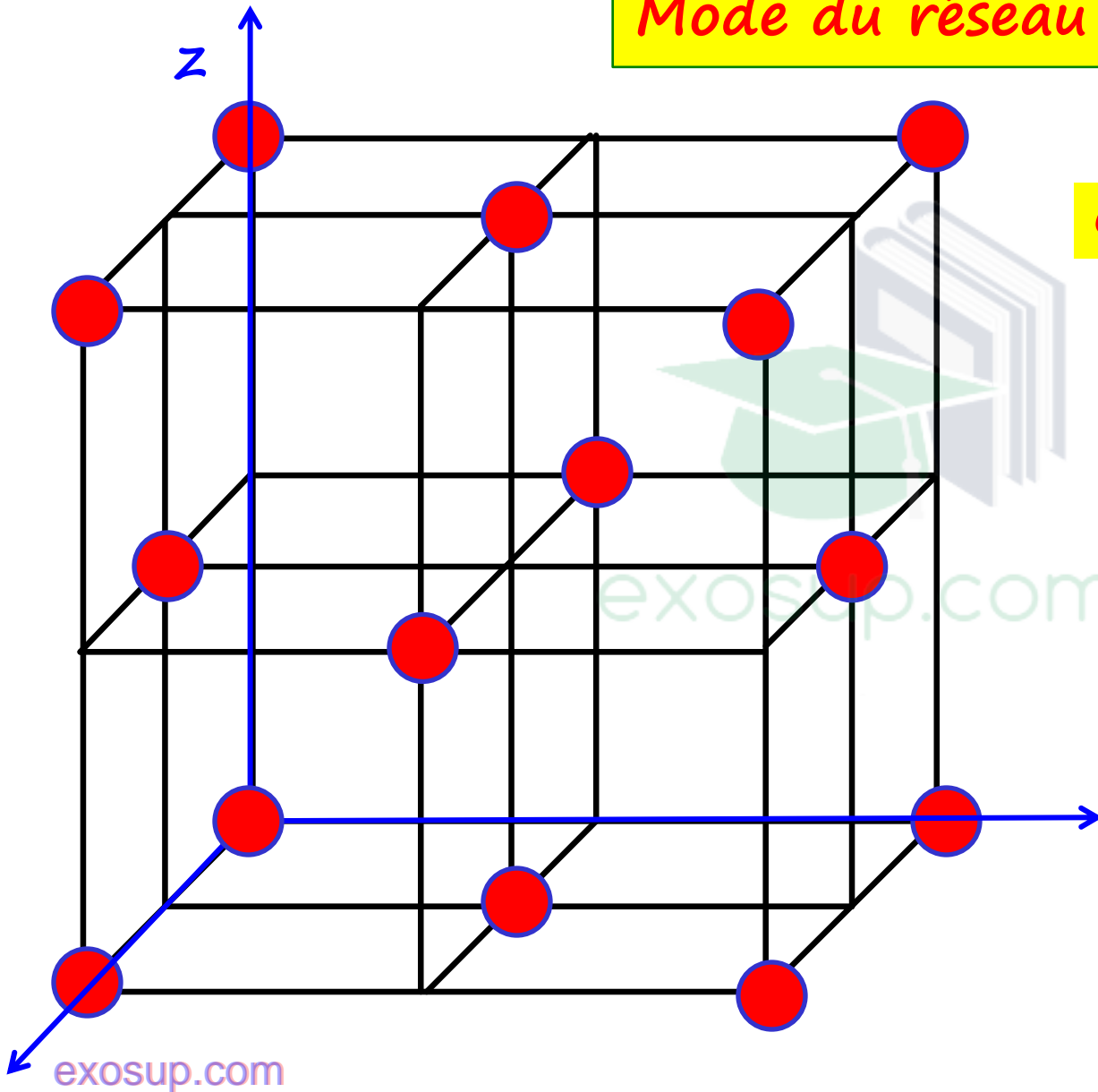
$(1/2, 0, 1/2)$

$(0, 1/2, 1/2)$

$(1/2, 1/2, 0)$

Structure Cubique à faces centrées

Mode du réseau cubique: Mode F



Coordonnées réduites

$(0, 0, 0)$

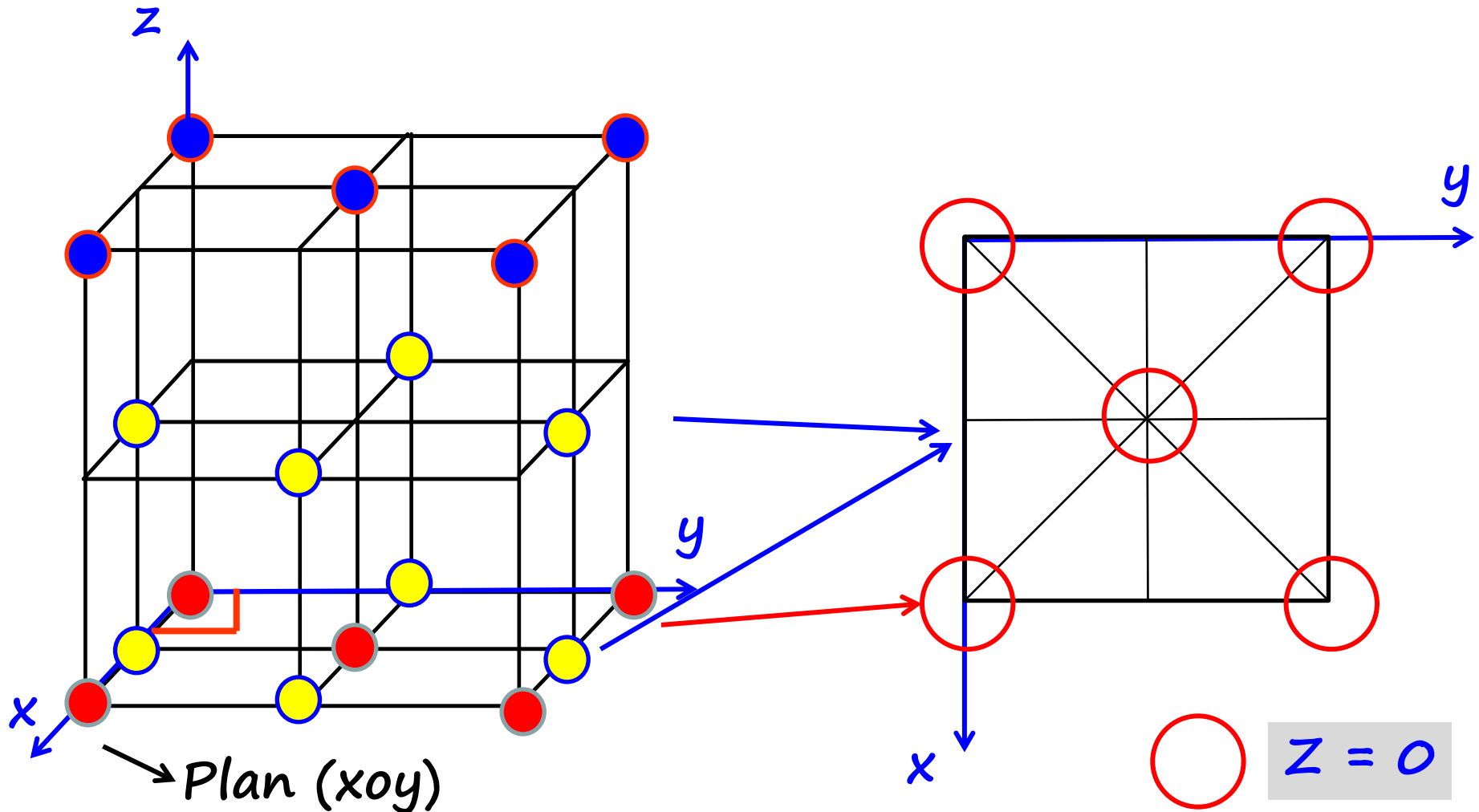
$(1/2, 0, 1/2)$

$(0, 1/2, 1/2)$

$(1/2, 1/2, 0)$

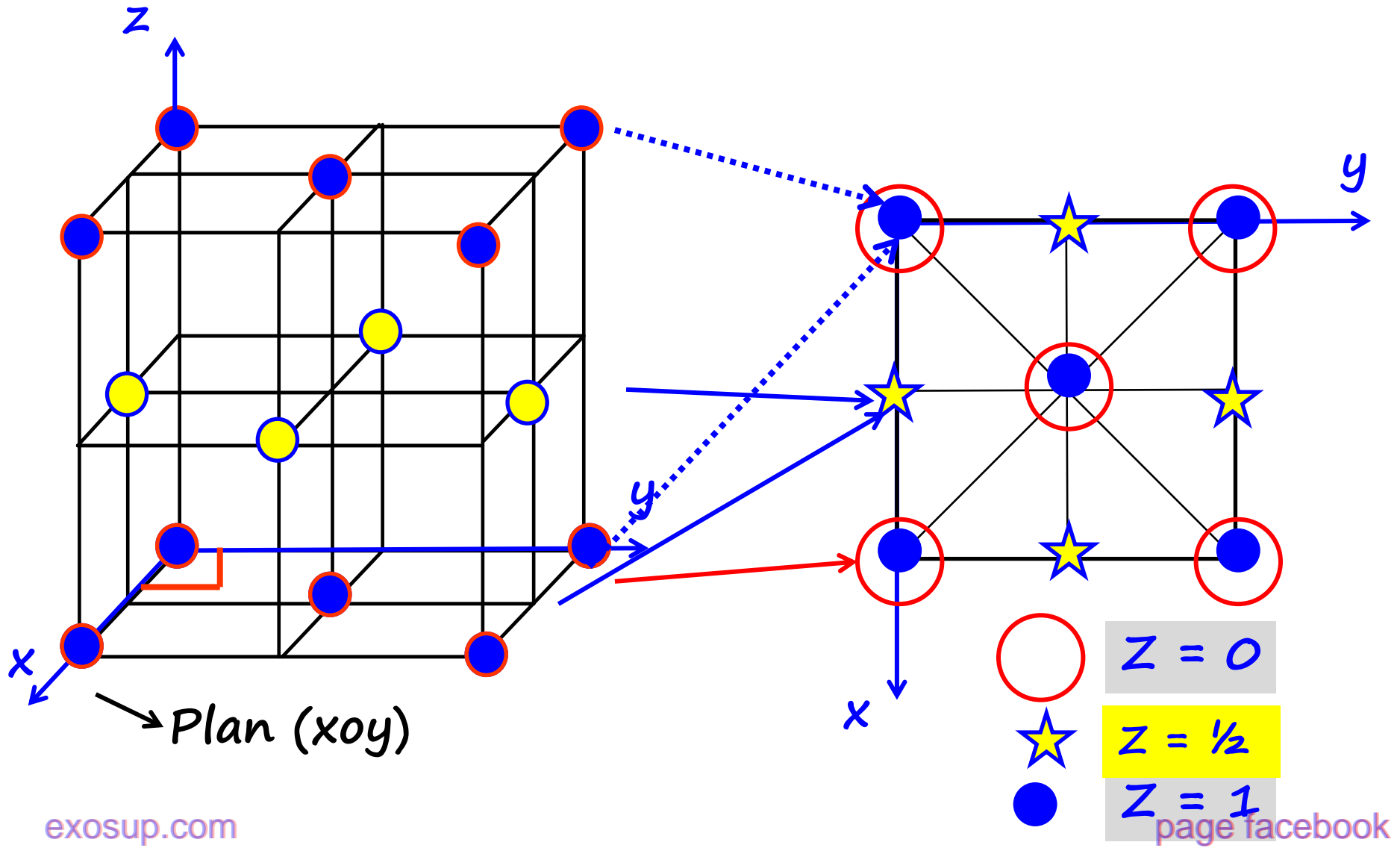
Structure Cubique à faces centrées, CFC

Mode du réseau cubique: Mode F



Structure Cubique à faces centrées, CFC

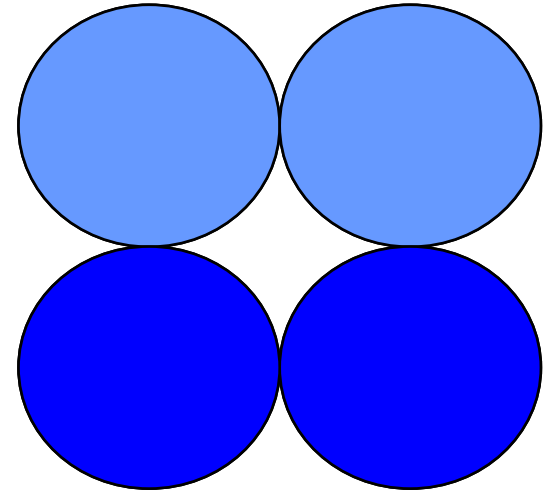
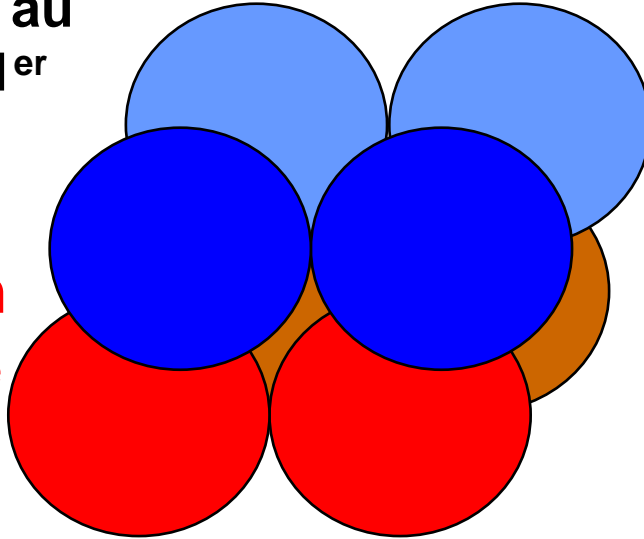
Mode du réseau cubique: Mode F



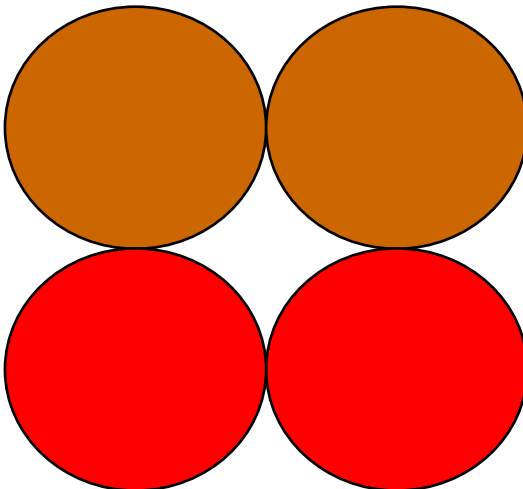
Structure Cubique simple

Emplilement d'un
2^{ème} plan A1 au
dessus du 1^{er}

Plan A1 en
perspective



Plan A1



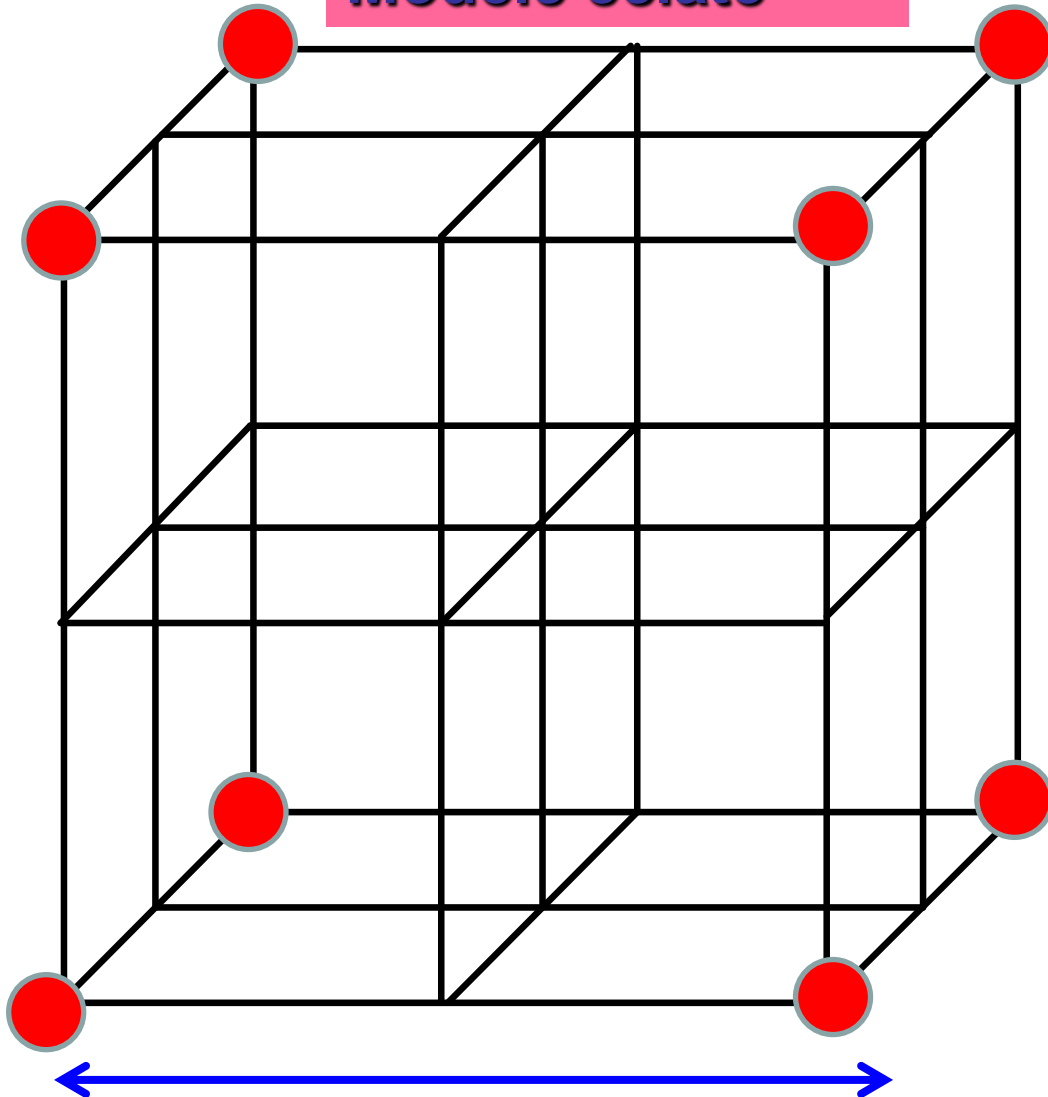
N.B. Les atomes sont colorés
différemment mais sont du
même type

Structure Cubique simple

Mode du réseau cubique: Mode P

CS

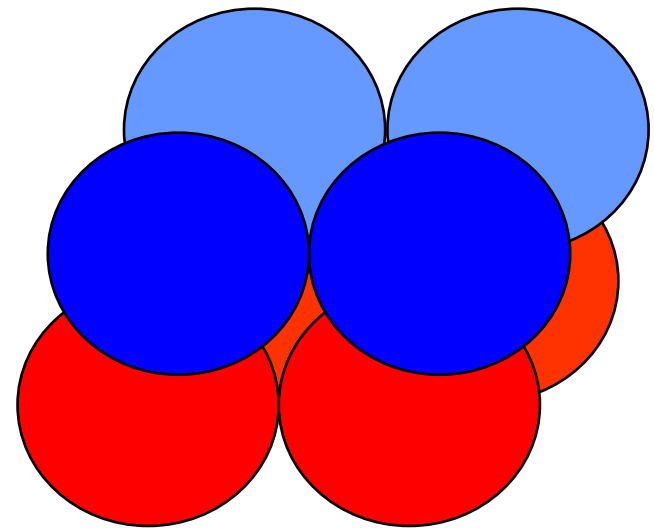
Modèle éclaté



Coordonnées réduites

$(0, 0, 0)$

La coordonnée réduite représente tous les sommets

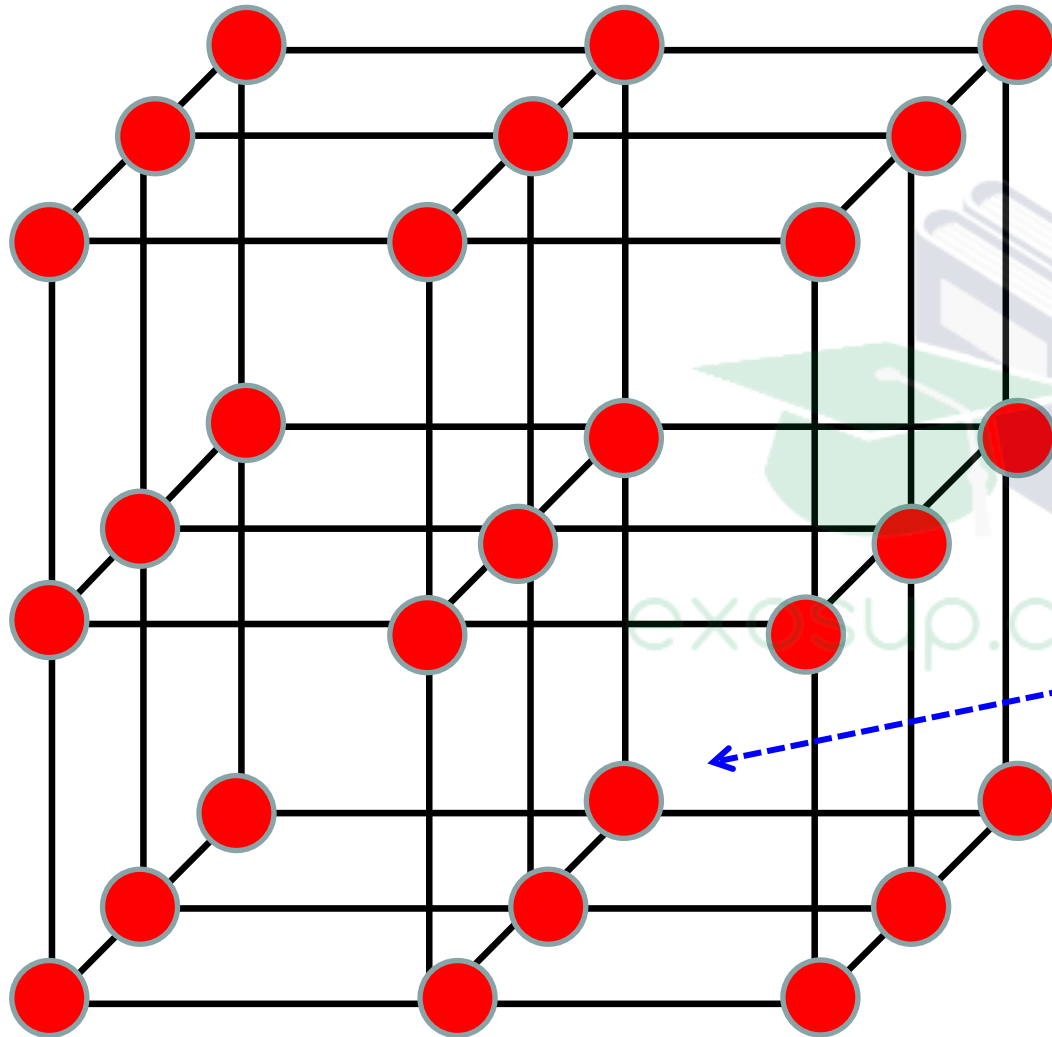


Modèle compact

Structure Cubique simple

Mode du réseau cubique: Mode P

CS



Coordonnées réduites

$(0, 0, 0)$

Examinons plusieurs mailles voisines

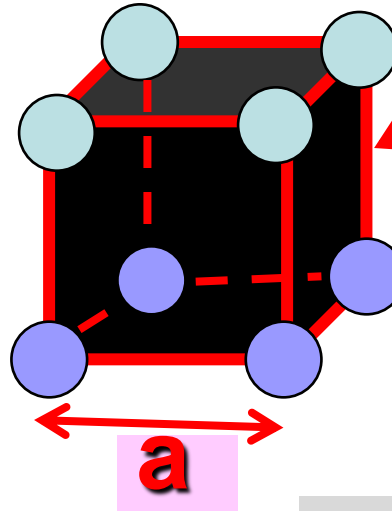
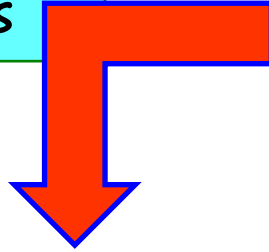
La 1^{ère} maille

Nous avons donc 8 mailles voisines

Paramètre a de la maille

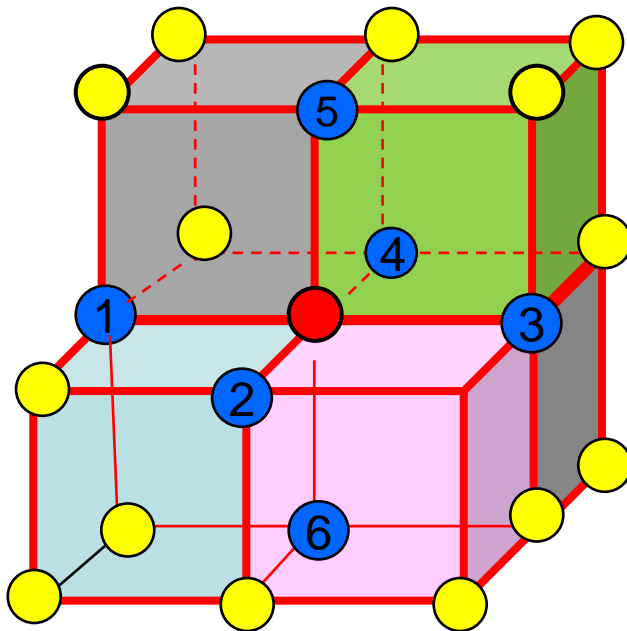
Structure Cubique simple

Examinons plusieurs mailles voisines



Maille cubique simple

d'arête a



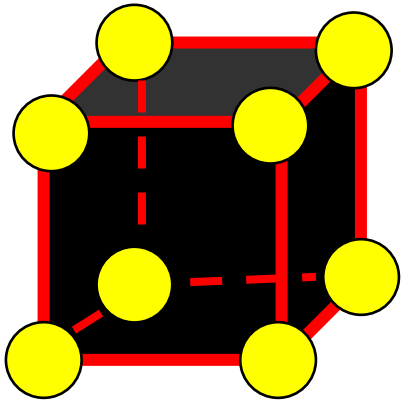
3- Coordinence :

= Nbre des plus proches voisins à égale distance

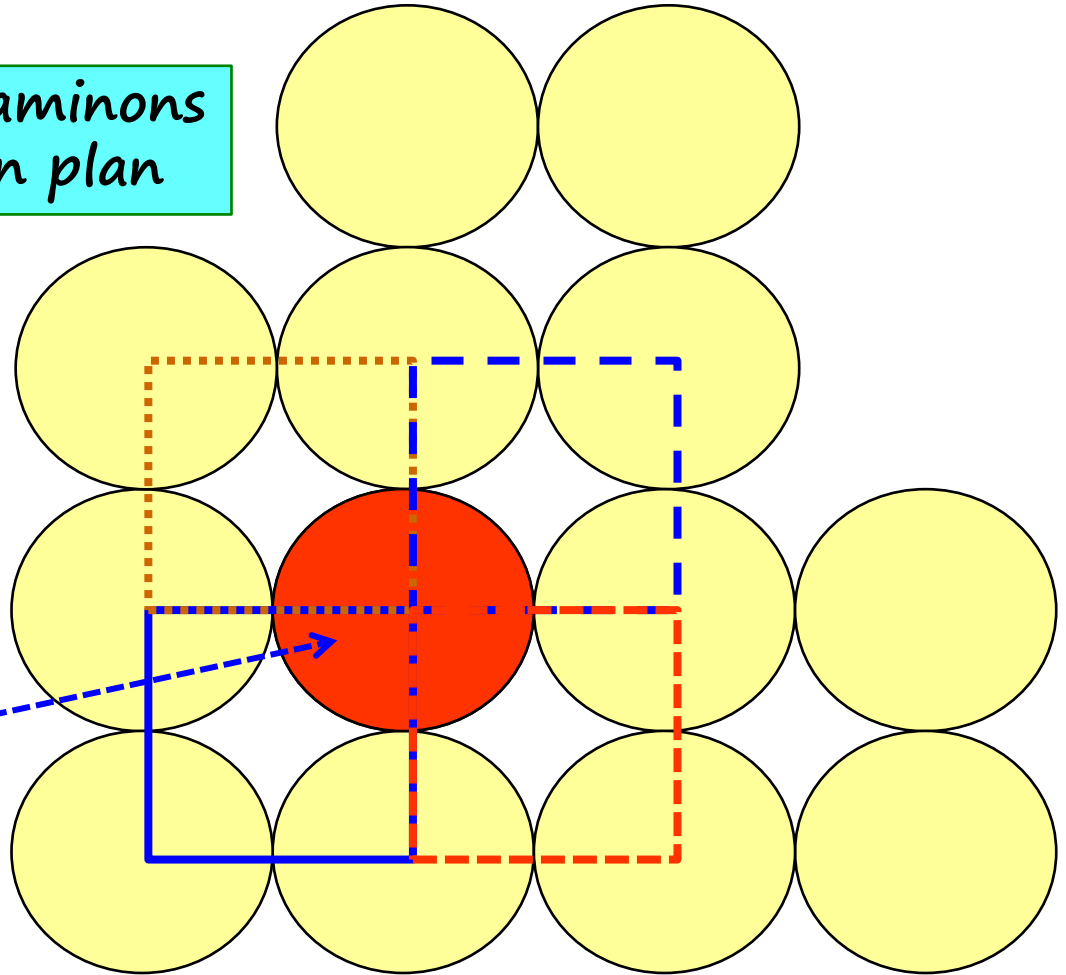
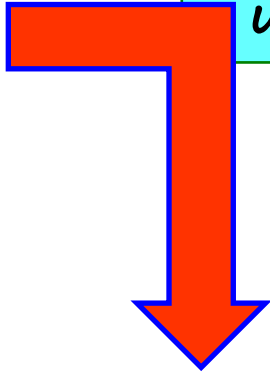
= chaque atome a 6 voisins tangents situés à la distance a

Coord (Cub. Simple) = 6

Structure Cubique simple



Examinons
un plan



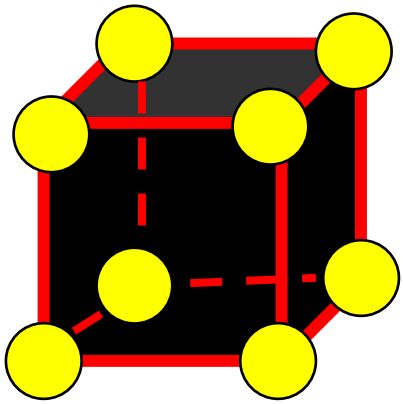
a

L'atome rouge
appartient à **4 mailles**
du **même plan**

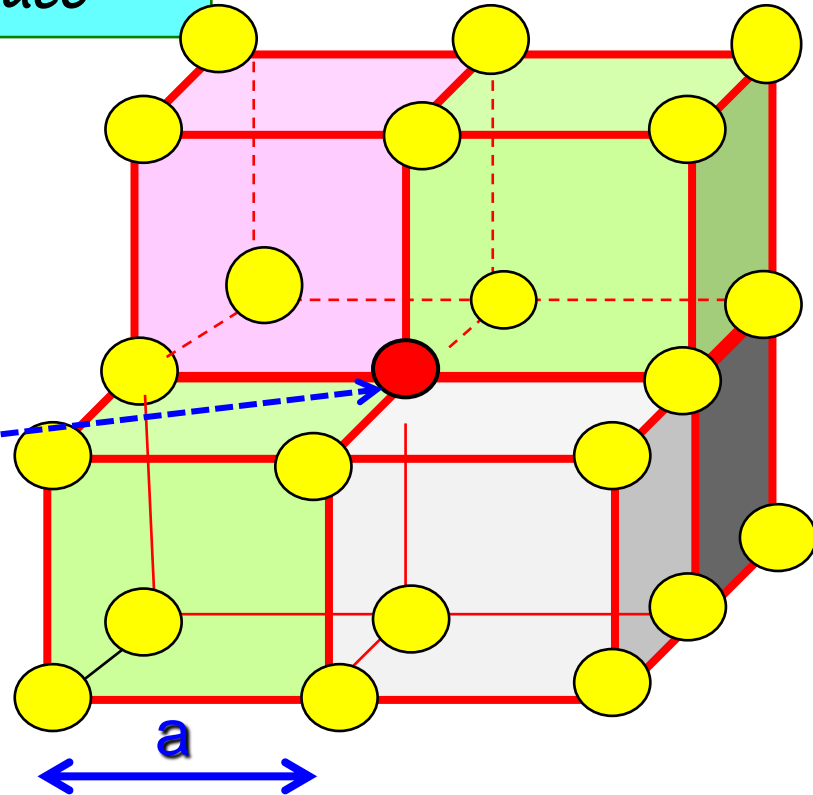
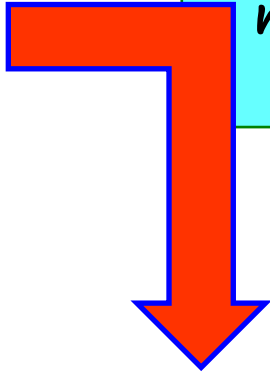
Il comptera pour la
maille par :
 $\frac{1}{4}$ atome

Dans un **plan**, une maille contient 4
sommets : **$4 \times \frac{1}{4} = 1$ atome/maille plane**

Structure Cubique simple



Examinons la maille dans l'espace



L'atome rouge appartient à **8 mailles** du **l'espace**

Il comptera pour la maille par :

$1/8$ atome

A trois dimensions, une maille contient **8** sommets : **$8 \times 1/8 = 1$** atome/maille

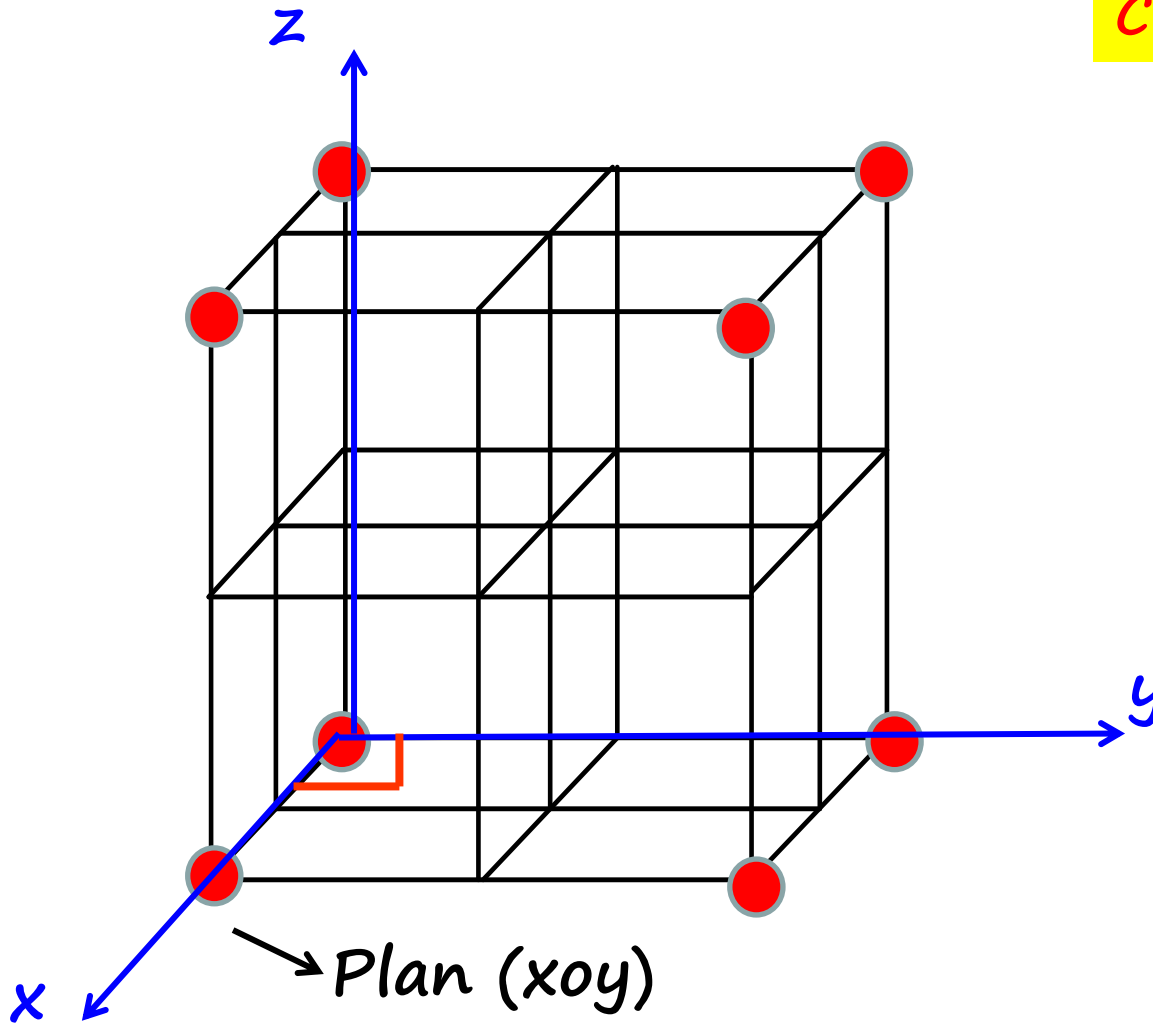
Structure Cubique simple

Mode du réseau cubique: Mode P

CS

Coordonnées réduites

$(0, 0, 0)$



Structure Cubique simple

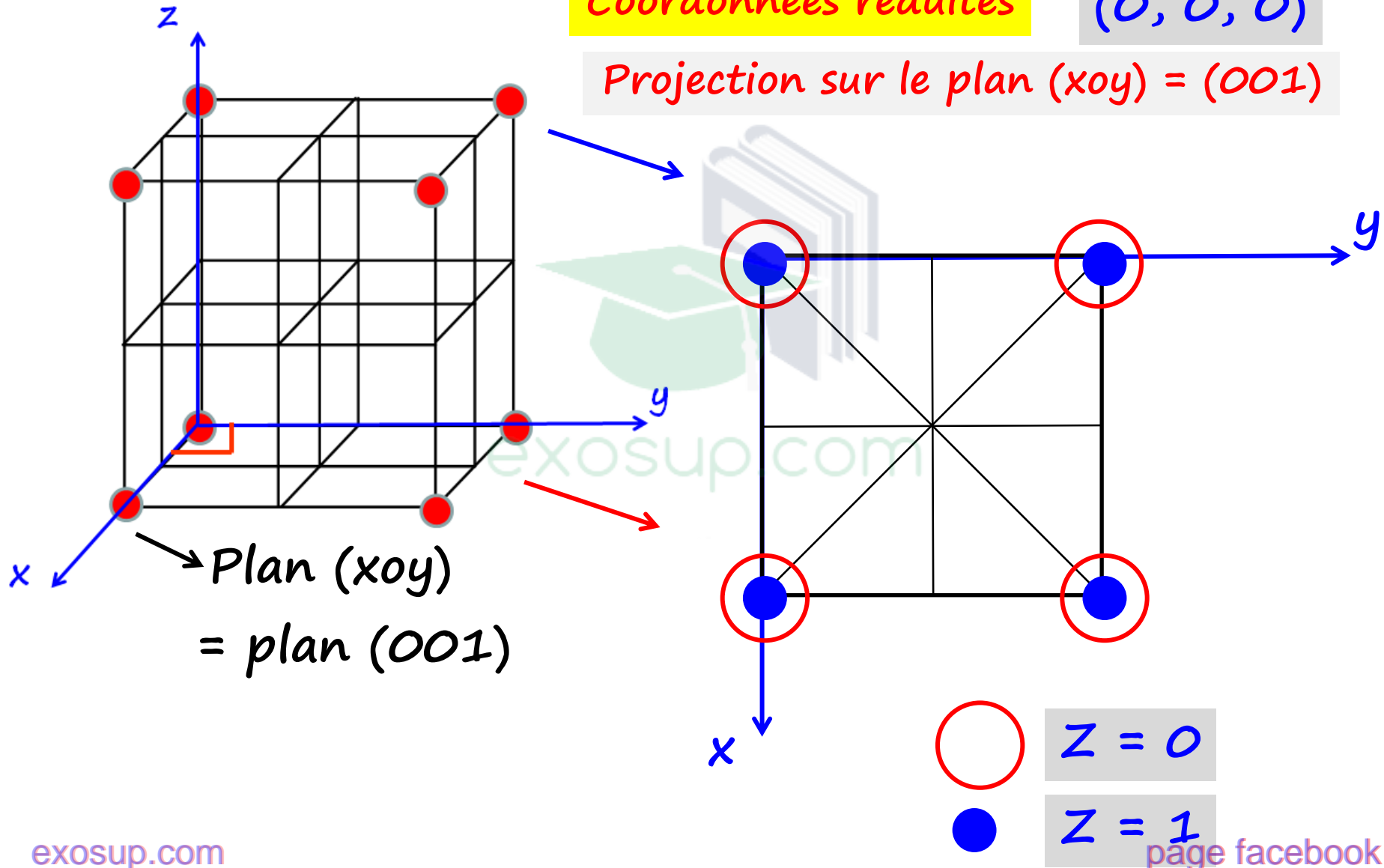
Mode du réseau cubique: Mode P

CS

Coordonnées réduites

$(0, 0, 0)$

Projection sur le plan (xoy) = (001)



Structure Cubique simple

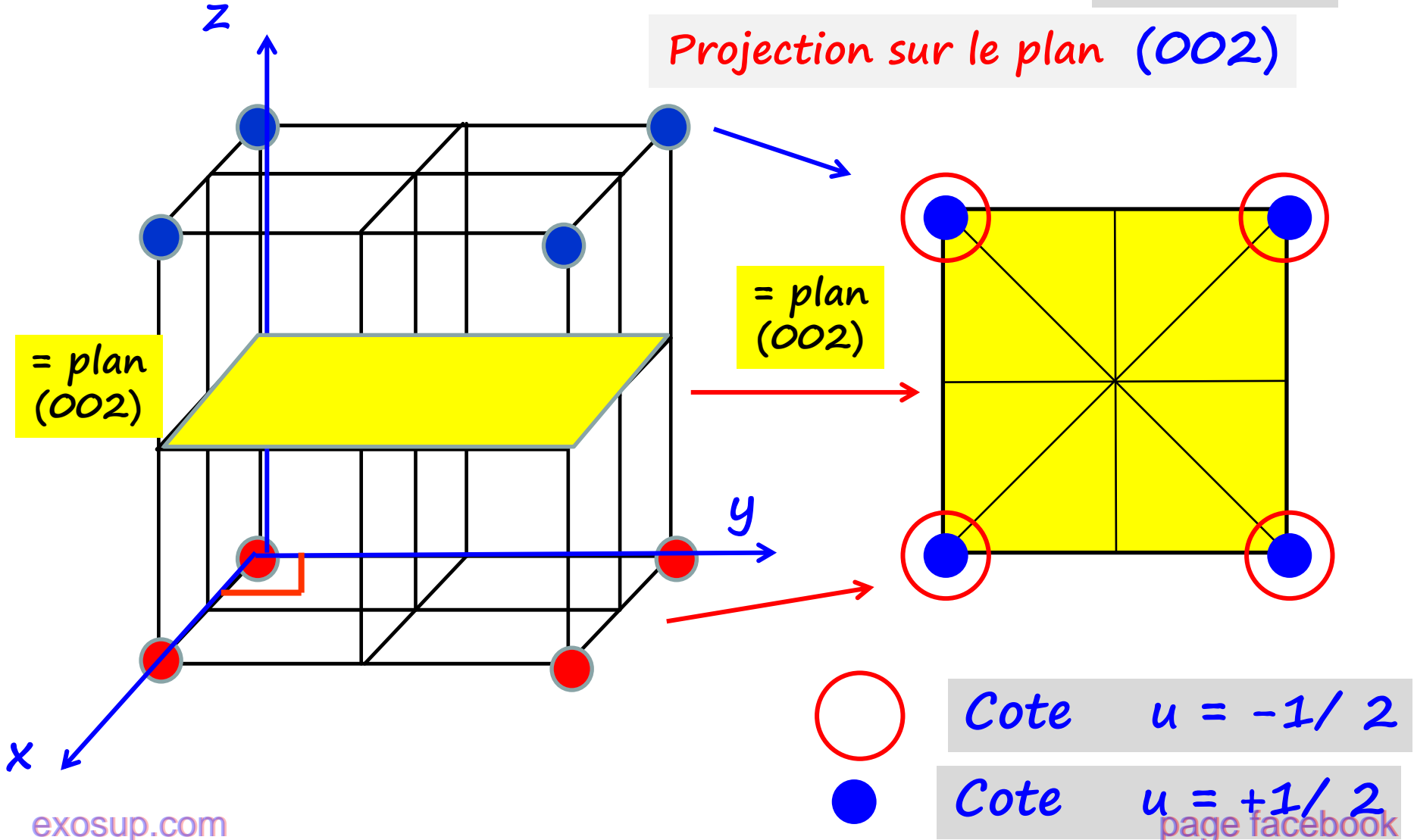
Mode du réseau cubique: Mode P

CS

Coordonnées réduites

$(0, 0, 0)$

Projection sur le plan (002)



Structure Cubique simple

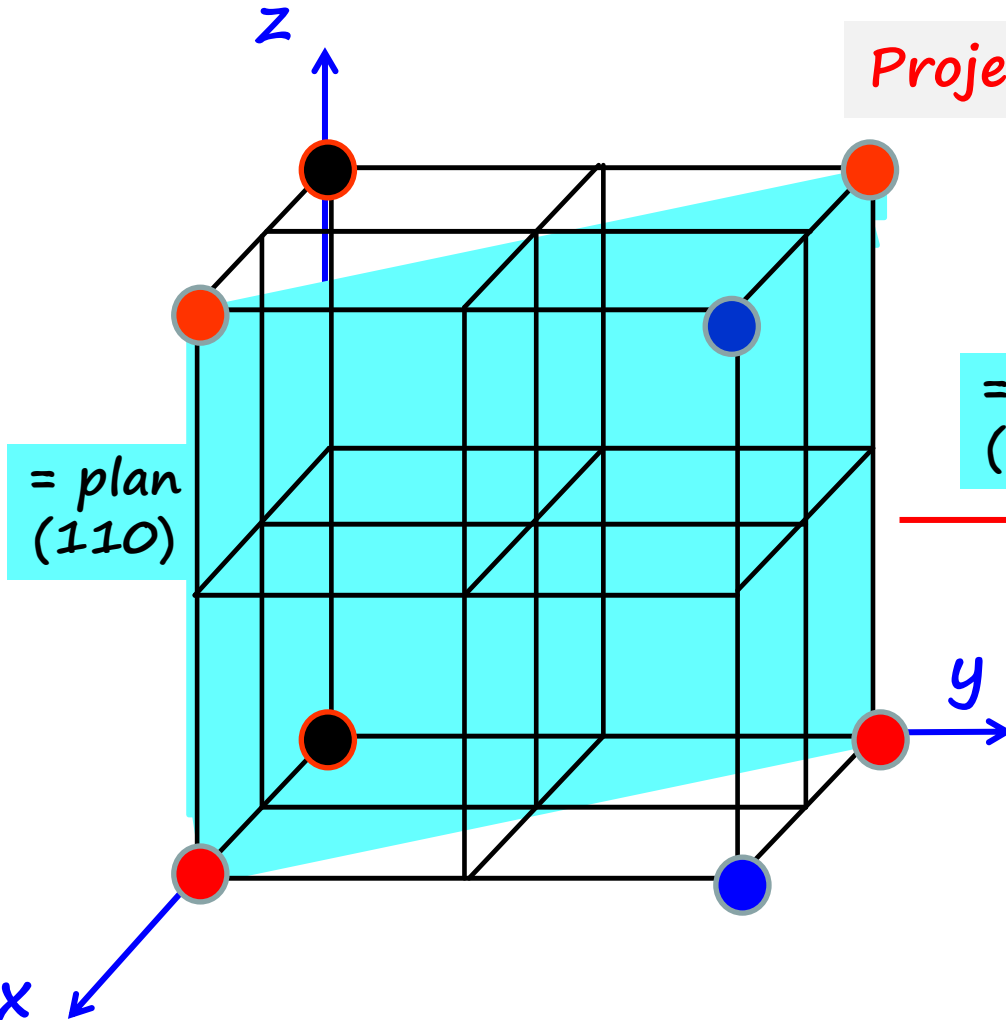
Mode du réseau cubique: Mode P

CS

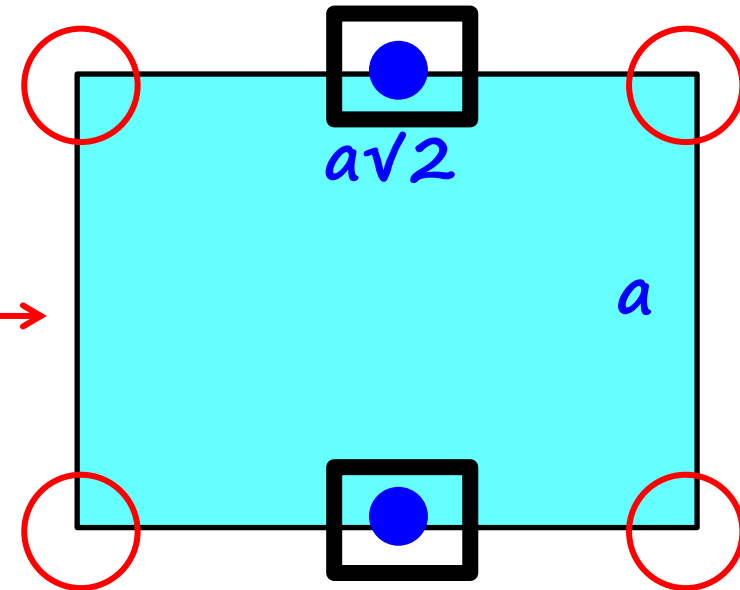
Coordonnées réduites

$(0, 0, 0)$

Projection sur le plan (110)



= plan
 (110)



Cote $u = 0$

Cote $u = + a\sqrt{2} / 2$

Cote $u = - a\sqrt{2} / 2$

Compacité ou taux de remplissage τ :

Compacité $\tau = \frac{n \cdot \text{Volume}(1 \text{ atome})}{\text{Volume}(1 \text{ maille})}$

Structure Cubique simple

Mode du réseau cubique: Mode P

CS

n = nbre d'atomes par maille
 $= 8 \times 1/8 = 1 \text{ atome / maille}$

$$V(1 \text{ atome}) = \left(\frac{4}{3}\right) \pi R^3$$

$$V(1 \text{ maille}) = a^3$$

Structure Cubique simple

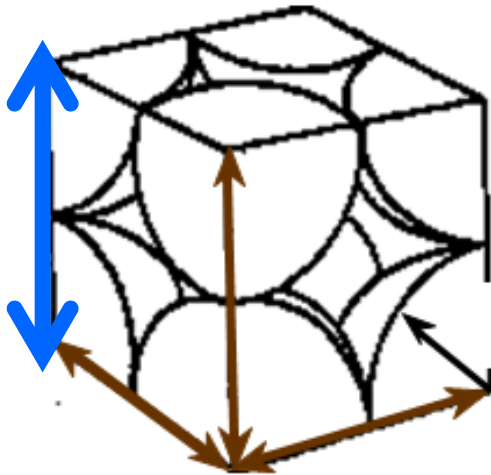
CS

Mode du réseau cubique: Mode P

$$n = \text{nbre d'atomes par maille} \\ = 8 \times 1/8 = 1 \text{ atome / maille}$$

$$V(1\text{atome}) = (4/3) \pi R^3$$

$$V(1\text{maille}) = a^3$$



les atomes sont tangents l'arête de la maille

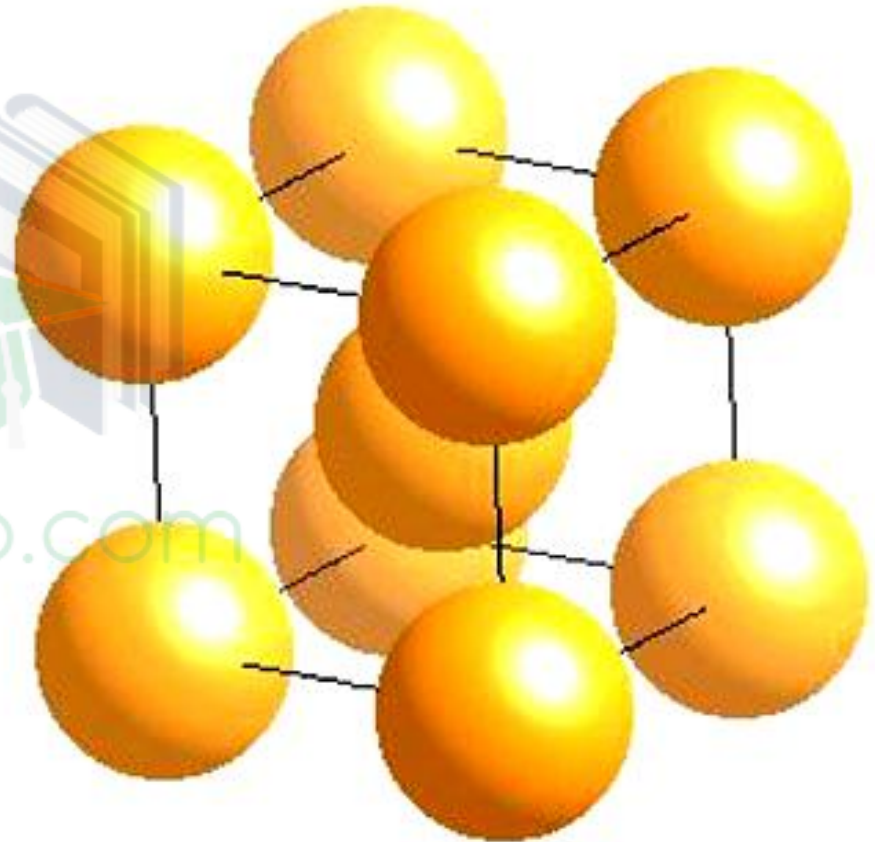
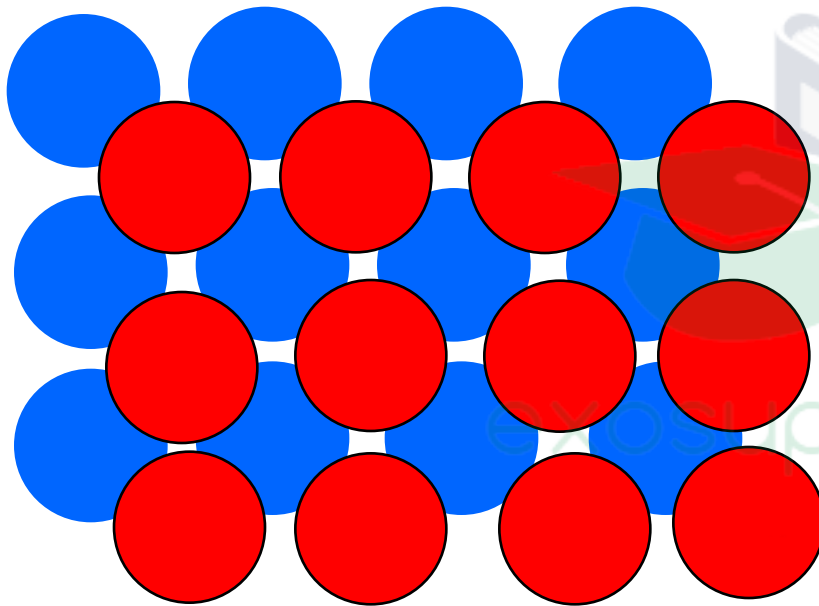
Relation de tangence :
 $2R = a$

D'où la relation :

$$\tau = \frac{1 \cdot (4/3) \pi R^3}{a^3} = \frac{1 \cdot (4/3) \pi (a/2)^3}{a^3} = 0,52$$

Le RESEAU CUBIQUE CENTRE : CC

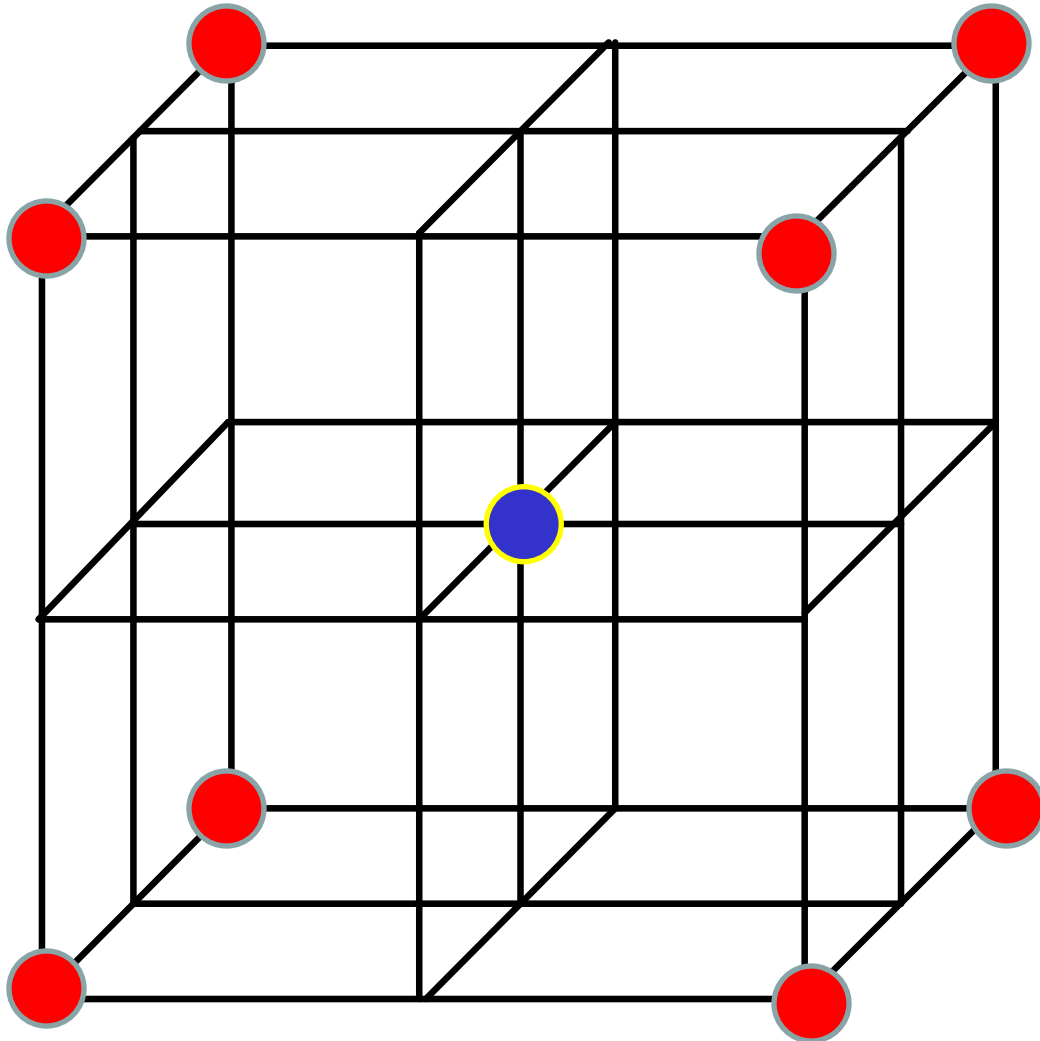
Plan A



Plan B

Structure Cubique centrée

Mode du réseau cubique: Mode I



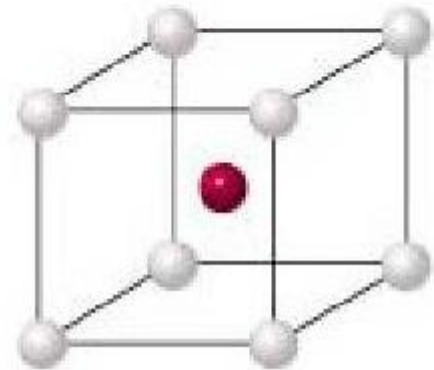
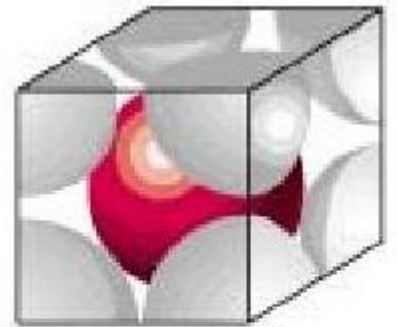
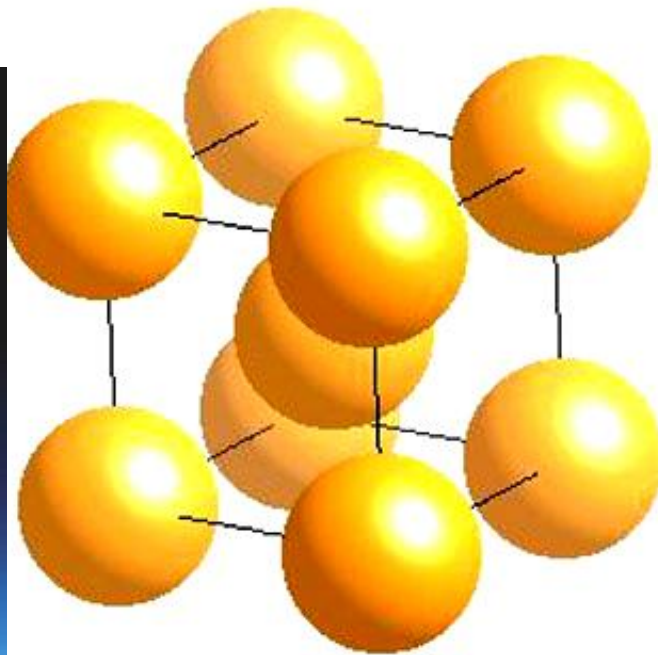
Coordonnées réduites

$(0, 0, 0)$ représente tous les sommets

$(1/2, 1/2, 1/2)$

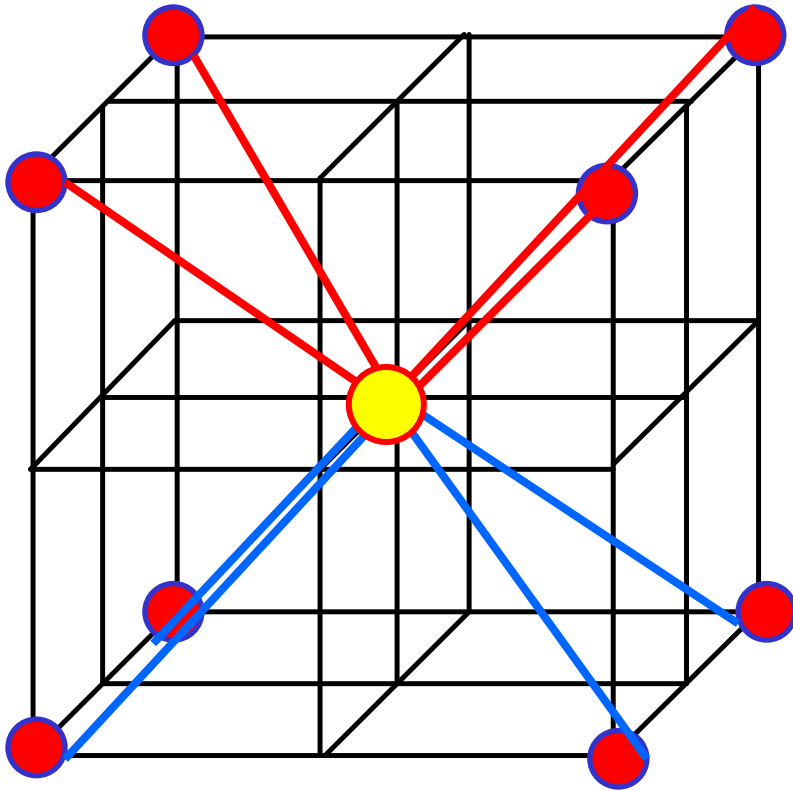
représente le centre la maille cubique

Structure Cubique centrée, Mode 1



On compte donc :
8 atomes (sommets) $\times 1/8$
+ 1 atome (centre) $\times 1$
= 2 atomes/maille

Structure Cubique centrée, Mode 1



coord. = ?

2 atomes sont situés
à la distance $a\sqrt{3}/2$.

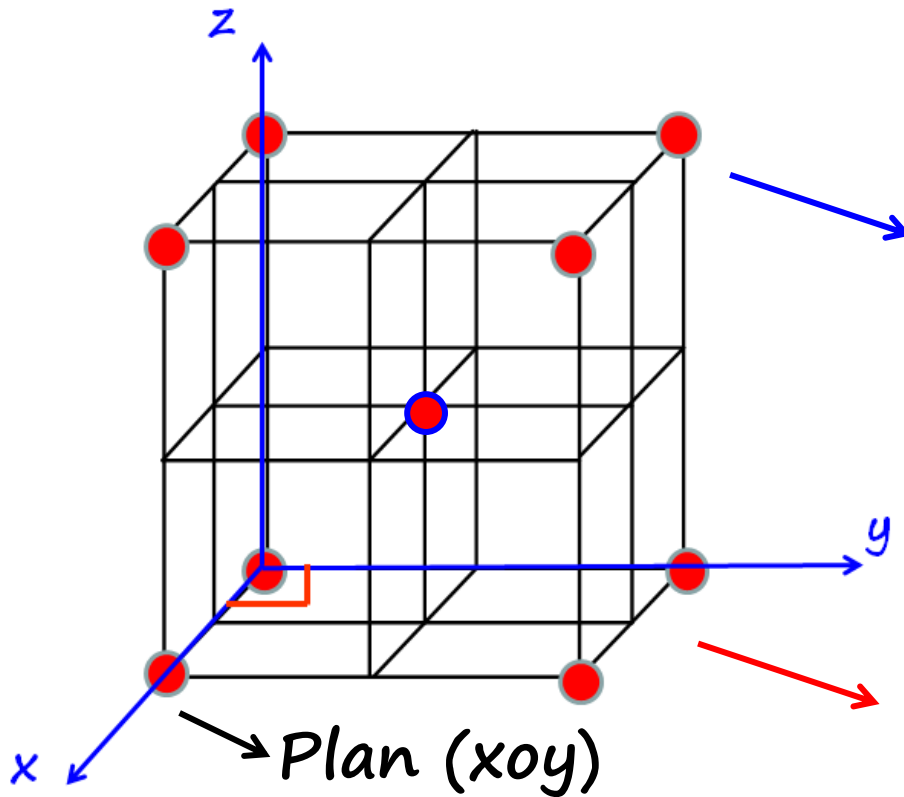
Chaque atome a
8 proches voisins

coord. = 8

Structure Cubique centré

Mode du réseau cubique: Mode I

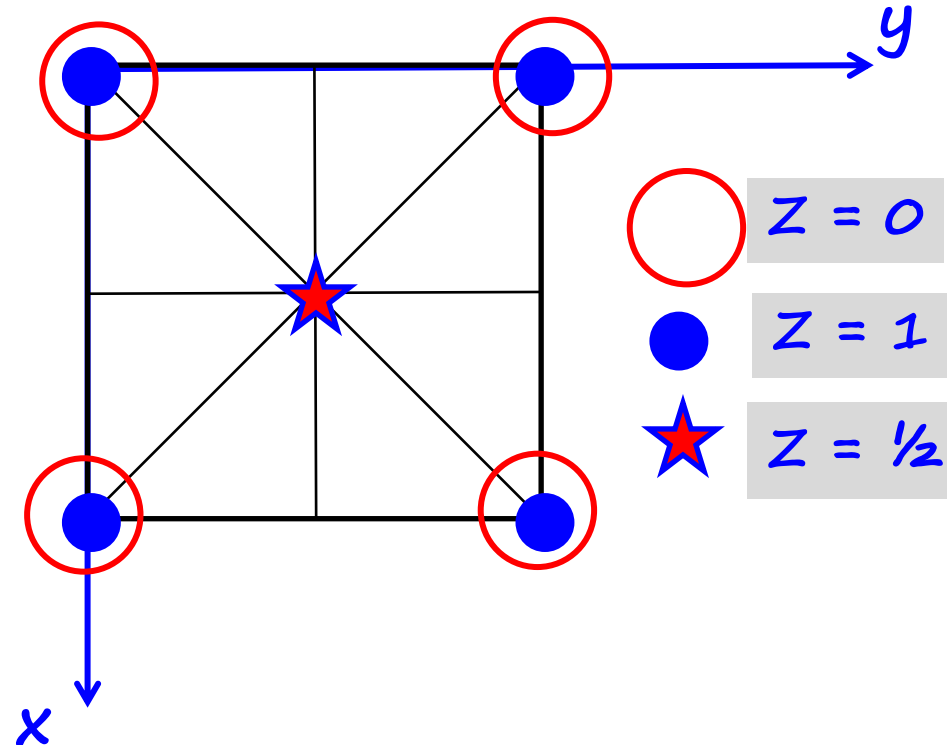
CC



Coordonnées réduites

$(0, 0, 0)$

$(1/2, 1/2, 1/2)$



Compacité ou taux de remplissage τ :

Compacité $\tau = \frac{n \cdot \text{Volume}(1 \text{ atome})}{\text{Volume}(1 \text{ maille})}$

Structure Cubique centré

Mode du réseau cubique: Mode I

CC

n = nbre d'atomes par maille

$$= 8 \times 1/8 + 1 = 2 \text{ atomes/maille}$$

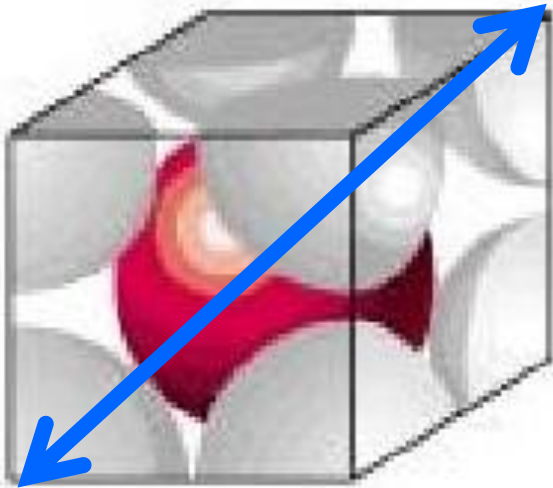
$$V(1 \text{ atome}) = \left(\frac{4}{3}\right) \pi R^3$$

$$V(1 \text{ maille}) = a^3$$

Ex : Cas d'une structure cubique centrée, **CC**

$n = 2$ atomes/maille

Or pour un **CC**, les atomes sont tangents la grande diagonale de la maille



Relation de tangence :
 $4R = a\sqrt{3}$

D'où la relation :

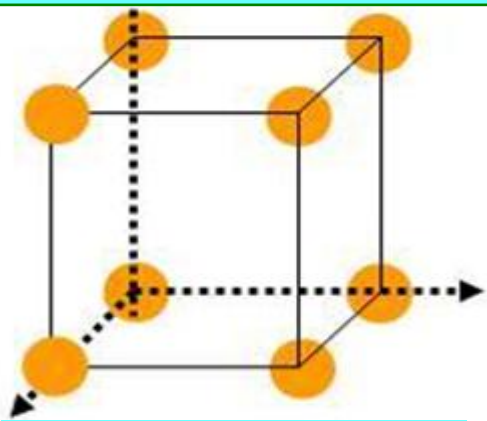
$$\tau = \frac{2 \cdot \left(\frac{4}{3}\right) \pi R^3}{a^3} = \frac{2 \cdot \left(\frac{4}{3}\right) \pi (a\sqrt{3}/4)^3}{a^3} = 0,68$$

Résumé

Cubique simple, Mode P

Cubique centré, Mode I

CFC, Mode F



coord. = 6

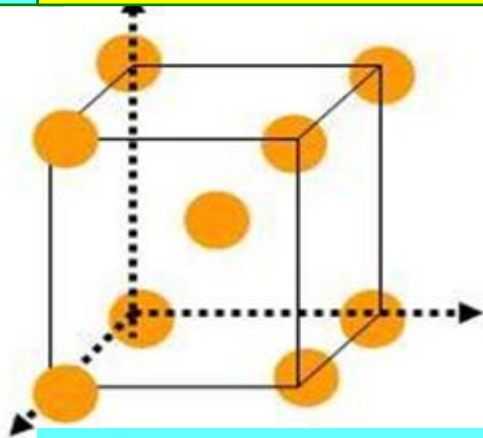
$$\tau = 0,52$$

1 at./maille

$$2R = a$$

Coordonnées réduites

(0, 0, 0)



coord. = 8

$$\tau = 0,68$$

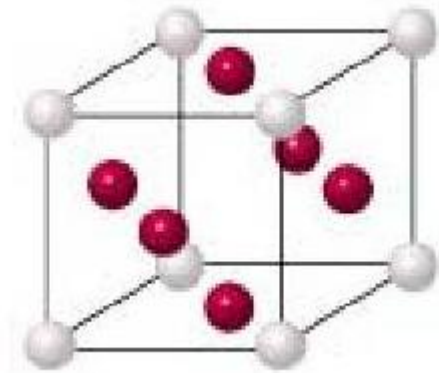
2 at./maille

$$4R = a\sqrt{3}$$

Coordonnées réduites

(0, 0, 0)

(1/2, 1/2, 1/2)



coord. = 12

$$\tau = 0,74$$

4 at./maille

$$4R = a\sqrt{2}$$

Coordonnées réduites

(0, 0, 0)

(1/2, 1/2, 0)

(1/2, 0, 1/2)

(0, 1/2, 1/2)